



Titre: Modélisation numérique d'écoulements de particules cohésives par
Title: la méthode des éléments discrets

Auteur: Alexandre E. Cabana
Author:

Date: 2013

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: E. Cabana, A. (2013). Modélisation numérique d'écoulements de particules
Citation: cohésives par la méthode des éléments discrets [Mémoire de maîtrise, École
Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/1145/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/1145/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:** François Bertrand, & Jamal Chaouki
Advisors:

Programme: Génie chimique
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENTS DE PARTICULES
COHÉSIVES PAR LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS DISCRETS

ALEXANDRE E. CABANA

DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE CHIMIQUE)

JUIN 2013

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

MODÉLISATION NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENTS DE PARTICULES COHÉSIVES PAR
LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS DISCRETS

présenté par : E. CABANA, ALEXANDRE

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès Sciences Appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. VIRGILIO, Nick, Ph.D., président

M. BERTRAND, François, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. CHAOUKI, Jamal, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. LEGROS, Robert, Ph.D., membre

DÉDICACE

*À ma famille et à ceux qui
m'ont toujours encouragé...*

REMERCIEMENTS

J'aimerais d'abord remercier François Bertrand et Jamal Chaouki de m'avoir donné l'opportunité de poursuivre mes études de maîtrise avec eux, mais surtout pour leur encouragement et leur support constant qu'ils m'ont donnés tout au long de mon parcours.

Un merci énorme à Ebrahim Alizadeh pour ses conseils et son aide précieuse, particulièrement en ce qui concerne les modifications apportées au code DEM, ainsi que pour ses nombreuses explications sur le fonctionnement du modèle JKR.

Merci à Olivier Dubé et Jonathan Bouffard qui étaient toujours disponibles pour répondre à mes questions, pour leurs conseils et encouragements.

Merci aux techniciens et aux autres étudiants qui ont de près ou de loin collaboré avec moi dans le cadre de ce projet.

Enfin, merci à mes amis, ainsi que ma famille qui ont toujours été là pour me supporter et m'encourager dans la poursuite de mes études universitaires et pour leur soutien dans les moments les plus difficiles.

RÉSUMÉ

Les écoulements de particules solides, présents dans différents types d'applications industrielles, présentent un comportement complexe et difficile à analyser. Dans le cadre des travaux effectués à l'unité de recherche sur les procédés d'écoulements industriels (URPEI), il a été constaté lors de certaines manipulations expérimentales dans un mélangeur rotatif qu'il est possible de contrôler la force cohésive présente entre des particules en enrobant ces dernières avec un certain type de polymère. En effet, il a été constaté que la force cohésive peut être augmentée soit par l'accroissement de l'épaisseur de polymère sur les particules, ou encore par l'augmentation de la température du lit de particules. Par ailleurs, une des manières permettant de mieux étudier les écoulements de particules solides est de procéder à des simulations informatiques, à l'aide de la méthode des éléments discrets (DEM). Cependant, le code informatique de l'URPEI, utilisant la DEM, ne permettait pas d'inclure de force cohésive entre les particules.

L'objectif principal de ce projet était donc la modélisation numérique de l'écoulement de particules cohésives. Pour ce faire, des modèles de cohésion appropriés ont été sélectionnés pour la direction normale du contact, ainsi que pour la direction tangentielle. Le modèle JKR fut retenu pour la direction normale, ainsi que le modèle de Thornton pour la direction tangentielle. Ces deux modèles ont été introduits dans le code informatique de l'URPEI, développé en Fortran 90. Afin de s'assurer du bon fonctionnement du programme, onze tests de vérification ont été effectués. Ceux-ci, contenant une, deux ou cinq particules, ont permis de s'assurer de la validité des résultats obtenus pour des impacts dans la direction normale du contact. La force tangentielle n'a pas été considérée, car cela dépassait le cadre du projet. En outre, afin de procéder à des écoulements de particules cohésives et d'évaluer la précision des résultats, des tests d'angles de repos statiques et des tests d'écoulements dans un mélangeur rotatif ont été effectués. Dans un premier temps, il a été démontré que l'augmentation de la force cohésive entre les particules permet d'augmenter l'angle de repos, ce qui est en accord avec la littérature. Par ailleurs, concernant les tests d'écoulements dans le mélangeur rotatif, il a été démontré que l'accroissement de la force cohésive entre les particules permet la dilatation du lit de particules, due à l'augmentation de la porosité.

ABSTRACT

Granular flows are present in various types of industrial applications and exhibit complex behaviors that are complex and difficult to analyze. In the context of the work carried out at the Research Unit on Industrial Flows (URPEI), it was discovered with some experiments in a rotating mixer that it is possible to control the cohesive force between particles by coating the latter with a certain type of polymer. Indeed, it was found that the cohesive force can be increased either by increasing the thickness of the polymer, or by increasing the temperature of the particle bed. In addition, one of the ways to study granular flows is to perform computer simulations using the discrete element method (DEM). However, the computer code based on the DEM and available at URPEI did not include the possibility to add cohesive forces between particles.

The main objective of this project was the numerical modeling of cohesive granular flows. To perform this task, appropriate cohesive models were selected for the normal direction of the contact, as well as for the tangential direction. The JKR model was used for the normal direction, and the Thornton model for the tangential direction. Both models were introduced in the computer code available at URPEI and developed in Fortran 90. To ensure the proper functioning of the program, eleven verification tests were performed. These tests, containing one, two or five particles have ensured the validity of the results obtained for impacts in the normal direction of the contact. In addition, in order to simulate cohesive granular flows and to validate the results, static repose angle tests were conducted as well as cohesive flows in a rotating mixer. First, it was shown that an increase of the cohesive force between particles increases the repose angle, which is in agreement with the literature. Also, for the simulations in the rotating mixer, it was shown that increasing the cohesive force between the particles allows the expansion of the particle bed due to the increase of porosity.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE.....	III
REMERCIEMENTS	IV
RÉSUMÉ.....	V
ABSTRACT	VI
TABLE DES MATIÈRES	VII
LISTE DES TABLEAUX.....	X
LISTE DES FIGURES.....	XI
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	XV
CHAPITRE 1 INTRODUCTION.....	1
1.1 Définitions et concepts de base	1
1.2 Éléments de la problématique	2
1.2.1 Écoulements libres et écoulements cohésifs	2
1.2.2 Motivation du projet de recherche	3
1.3 Objectif général de recherche.....	7
1.4 Plan du mémoire.....	7
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	8
2.1 Méthode des éléments discrets	8
2.1.1 La détection des contacts pour des particules sphériques	9
2.1.2 Forces de contact lors d'une collision	10
2.1.3 Bilan de forces.....	14
2.1.4 Calcul de la nouvelle position	14
2.2 Forces cohésives entre les particules.....	16
2.2.1 Cohésion « humide ».....	17

2.2.2	Cohésion « sèche »	18
2.2.3	Travail d'adhésion et énergie de surface.....	21
2.3	Modèles de cohésion pour la direction normale.....	22
2.3.1	Bradley	22
2.3.2	JKR.....	23
2.3.3	DMT	27
2.3.4	DLVO.....	28
2.3.5	Forces capillaires et ponts liquides.....	30
2.3.6	Autres modèles pour la direction normale	34
2.4	Modèle de cohésion pour la direction tangentielle.....	37
2.5	Sélection judicieuse d'un modèle de cohésion en modélisation numérique	39
2.6	Vérification et évaluation de la précision.....	41
2.6.1	Vérification.....	41
2.6.2	Évaluation de la précision	42
2.7	Objectifs spécifiques	46
CHAPITRE 3	MÉTHODOLOGIE	47
3.1	Modèle de cohésion utilisé.....	47
3.1.1	Direction normale.....	47
3.1.2	Direction tangentielle	50
3.2	Implantation du modèle de cohésion dans le code DEM.....	50
3.3	Vérification du code DEM cohésif.....	52
3.4	Méthodes pour l'évaluation de la précision	56
3.4.1	Propriété des particules pour les tests d'évaluation de la précision	56
3.4.2	Angle de repos.....	57

3.4.3	Dilatation de volume	61
CHAPITRE 4 RÉSULTATS ET DISCUSSION		66
4.1	Résultats des tests de vérification.....	66
4.2	Résultats de l'évaluation de la précision	77
4.2.1	Augmentation de l'angle de repos en fonction du nombre de Bond	77
4.2.2	Dilatation de volume dans le sphéroniseur	84
4.2.3	Résumé de l'étape d'évaluation de la précision	94
CHAPITRE 5 CONCLUSION		95
5.1	Synthèse des travaux	95
5.2	Limitations et recommandations	95
BIBLIOGRAPHIE		97

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1: Valeurs typiques d'énergie de surface (TWI, 2013)	21
Tableau 2.2: Exemples de simulations effectuées avec le modèle JKR implanté dans un code DEM	26
Tableau 2.3: Exemples de simulations effectuées avec le modèle DLVO implanté dans un code DEM	30
Tableau 2.4: Exemples de simulations effectuées avec des ponts liquides implantés dans un code DEM	33
Tableau 2.5: Exemples de simulations effectuées avec le modèle de Luding implanté dans un code DEM	35
Tableau 3.1: Valeurs utilisées pour sélectionner un modèle approprié à partir du plan d'adhésion	48
Tableau 3.2: Valeurs obtenues pour sélectionner un modèle approprié à partir du plan d'adhésion	48
Tableau 3.3: Propriétés des particules utilisées pour les tests de vérification.....	52
Tableau 3.4: Propriétés des particules utilisées pour les tests d'évaluation de la précision	56
Tableau 3.5: Valeurs des B_0 et de travail d'adhésion pour les simulations d'angles de repos	60
Tableau 3.6: Valeurs des B_0 et de travail d'adhésion pour les tests de reproductibilité.....	61
Tableau 3.7: Valeurs de travail d'adhésion pour les tests d'écoulement dans le sphéroniseur.....	63
Tableau 3.8: Simulations supplémentaires dans le sphéroniseur	65
Tableau 4.1: Tests complétés et non complétés pour la dilatation de volume	84

LISTE DES FIGURES

Figure 1-1: Exemple de sphéroniseur en fonctionnement (LCI, 2012).....	3
Figure 1-2: Cohésion de deux particules et diffusion des chaînes polymériques : a) Approche de deux particules; b) Interdiffusion des chaînes polymériques; c) Séparation des particules avec formation de cavités; c) Détachement complet (Bouffard, <i>et al.</i> , 2012a).....	4
Figure 1-3: Les quatre régimes d'écoulement observés expérimentalement (Bouffard, <i>et al.</i> , 2012b).....	6
Figure 2-1: Détection d'un contact entre deux particules sphériques	10
Figure 2-2: Forces cohésives en fonction du diamètre de particule (Zhu, Zhou, Yang, & Yu, 2007).....	16
Figure 2-3: Exemple de pont liquide (S. C. Yang & Hsiao, 2001)	17
Figure 2-4: Collision de deux particules : (a) contact selon le modèle de Hertz, (b) contact selon le modèle JKR (Lee, <i>et al.</i> , 2008)	23
Figure 2-5: Modèle JKR (Bharat, 1998; Lee, <i>et al.</i> , 2008)	23
Figure 2-6: Collision de deux particules avec cohésion (Brilliantov, Albers, Spahn, & Poschel, 2007).....	25
Figure 2-7: Modèle DMT (Bharat, 1998).....	27
Figure 2-8: Énergie en fonction de la distance pour le modèle DLVO (Malvern, 2013)	29
Figure 2-9: Exemple de pont liquide (Lian, <i>et al.</i> , 1993).....	31
Figure 2-10: Illustration du modèle de Luding (Sarkar & Wassgren, 2010)	34
Figure 2-11: Plan d'adhésion de Johnson & Greenwood (1997)	39
Figure 2-12: Plan d'adhésion de Liu <i>et al.</i> (2010)	40
Figure 2-13: Exemples d'angles statiques obtenus par Nase, <i>et al.</i> (2001). L'image de gauche représente des particules dont les forces cohésives sont absentes. L'image de droite représente des particules humides avec la présence de forces capillaires	42

Figure 2-14: Exemples d'angles statiques obtenus par Matuttis & Schinner (2001). L'image de gauche représente des particules dont les forces cohésives sont faibles. L'image de droite représente des particules dont les forces cohésives sont élevées	42
Figure 2-15: Orifice colmaté à cause de forces cohésives trop importantes (Matuttis & Schinner, 2001).....	43
Figure 2-16: Exemple de résultats expérimentaux de dilatation de volume de poudres cohésives, dans un mélangeur rotatif, en fonction du nombre de révolutions (Faqih, Chaudhuri, Muzzio, <i>et al.</i> , 2006).....	44
Figure 2-17: Différentes valeurs du coefficient adimensionnel de décharge en fonction du nombre de Bond (Anand, <i>et al.</i> , 2009)	45
Figure 3-1: Plan d'adhésion pour le choix du modèle de cohésion à utiliser pour la direction normale.....	49
Figure 3-2: Disposition des cubes pour les tests d'angle de repos	58
Figure 3-3: Surface inférieure du cube de 20 cm possédant une fente de 5 cm.....	58
Figure 3-4: Remplissage du cube supérieur	59
Figure 3-5: Dimensions du sphéroniseur	61
Figure 3-6: Calcul du volume de la forme toroïdale	64
Figure 4-1: Variation de la hauteur pour test 1 de l'étape de vérification	66
Figure 4-2: Variation de la vitesse pour le test 1 de l'étape de vérification.....	67
Figure 4-3: Variation de la position en X pour le test 2 de l'étape de vérification	67
Figure 4-4: Variation de la vitesse pour le test 2 de l'étape de vérification.....	68
Figure 4-5: Variation de la hauteur pour le test 3 de l'étape de vérification.....	68
Figure 4-6: Variation de la vitesse pour le test 3 de l'étape de vérification.....	69
Figure 4-7: Variation de la position en X pour le test 4 de l'étape de vérification	69
Figure 4-8: Variation de la vitesse pour le test 4 de l'étape de vérification.....	70

Figure 4-9: Variation de la hauteur pour le code DEM modifié le test 5 de l'étape de vérification	70
Figure 4-10: Variation de la hauteur pour le code DEM original pour le test 5 de l'étape de vérification	71
Figure 4-11: Variation de la position en X code DEM modifié pour le test 6 de l'étape de vérification	72
Figure 4-12: Variation de la position en X du code DEM original pour le test 6 de l'étape de vérification	72
Figure 4-13: Variation de la hauteur du code DEM modifié pour le test 7 de l'étape de vérification	73
Figure 4-14: Variation de la hauteur du code DEM original pour le test 7 de l'étape de vérification	73
Figure 4-15: Variation de la position en X du code DEM modifié pour le test 8 de l'étape de vérification	74
Figure 4-16: Variation de la position en X du code DEM original pour le test 8 de l'étape de vérification	74
Figure 4-17: Variation de la vitesse pour le test 9 de l'étape de vérification.....	75
Figure 4-18: Variation de la vitesse pour le test 10 de l'étape de vérification.....	76
Figure 4-19: Variation de la vitesse pour le test 11 de l'étape de vérification.....	76
Figure 4-20: Angles de repos obtenus pour la vidange du cube	80
Figure 4-21: Angle de repos en fonction du nombre de Bond	81
Figure 4-22: Tests de reproductibilité pour les tests d'angle de repos	83
Figure 4-23: Profils du lit de particules dans le sphéroniseur selon une coupe dans la direction azimutale, pour différentes valeurs de travail d'adhésion.....	86
Figure 4-24: Ajout du bloc de particules dans le sphéroniseur	87
Figure 4-25: Transition entre $W = 12 \text{ J/m}^2$ et $W = 14 \text{ J/m}^2$ dans le sphéroniseur.....	87

Figure 4-26: Volume du lit de particules dans le sphéroniseur en fonction du travail d'adhésion	88
Figure 4-27: Pourcentage de dilatation du volume du lit de particules dans le sphéroniseur en fonction du travail d'adhésion.....	88
Figure 4-28: Variation du volume du lit de particules dans le sphéroniseur pour $W = 0,5 \text{ J/m}^2$...	89
Figure 4-29: Légende pour les profils de vitesse	90
Figure 4-30: Profils de vitesse en fonction du travail d'adhésion dans le sphéroniseur	93

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

CAD	Coefficient de décharge adimensionnel
DEM	Méthode des éléments discrets
URPEI	Unité de recherche sur les procédés d'écoulements industriels
a	Accélération (m/s^2), rayon de contact (m)
a_0	Rayon de contact initial (m)
A_H	Constante d'Hamaker (J)
B_0	Nombre de Bond (-)
c_N	Facteur d'amortissement normal (-)
c_T	Facteur d'amortissement tangentiel (-)
C	Coefficient d'amortissement (-)
d_p	Diamètre d'une particule (m)
D	Distance entre deux centres de masse (m)
D_e	Distance d'équilibre (m)
E, E^*	Module d'Young (Pa), module d'Young réduit (Pa)
E_D	Énergie due à l'interaction de Debye (J)
E_K	Énergie due à l'interaction de Keesom (J)
E_L	Énergie due aux forces de dispersion de London (J)
E_{VdW}	Énergie potentielle de Van der Waals (J)
F_{Adh}	Force adhésive (N)
$F_{Archimède}$	Poussée d'Archimède (N)
F_{cap}	Force capillaire (N)
F	Force (N)

F_c	Force de contact entre deux particules (N)
F_c^T	Force tangentielle critique (N)
F_{EC}	Force électrostatique (N)
F^N	Force selon la direction normale du contact (N)
F^T	Force selon la direction tangentielle du contact (N)
F_e^N	Force élastique selon la direction normale du contact (N)
F_e^T	Force élastique selon la direction tangentielle du contact (N)
F_d^N	Force d'amortissement selon la direction normale du contact (N)
F_d^T	Force d'amortissement selon la direction tangentielle du contact (N)
$F_{gravité}$	Force gravitationnelle (N)
F_p	Force de retrait (N)
F_{PL}	Force totale d'un pont liquide (N)
F_{pt}^N	Force potentielle selon la direction normale du contact (N)
F_T	Force totale nette (N)
$F_{traînée}$	Force de traînée (N)
F_v	Force visqueuse (N)
F_{VdW}	Force de Van der Waals (N)
g	Accélération gravitationnelle (m/s^2)
G, G^*	Module de cisaillement (Pa), module de cisaillement réduit (-)
h	Constante de Planck ($m^2 \cdot kg/s$)
I	Moment d'inertie ($kg \cdot m^2$)
k	Constante de rappel du ressort (N/m)
$K_B T$	Énergie thermique (J)
m	Masse (kg)

m_{ij}	Masse moyenne des particules i et j (kg)
q	Charge électrique (C)
R, R^*	Rayon (m), rayon réduit (m)
t	Temps (s)
T	Torque (N·m)
ν	Coefficient de Poisson (-), fréquence (s ⁻¹)
V	Volume (m ³), vitesse (m/s)
V_n	Vitesse selon la direction normale (m/s)
V_t	Vitesse selon la direction tangentielle (m/s)
W	Travail thermodynamique d'adhésion (J/m ²)
x_{ij}	Distance entre deux particules lorsque le potentiel ϕ est nul (m)
x, y, z	Coordonnées cartésiennes (m)
z_0	Distance d'équilibre entre deux surfaces (m)
α	Polarisabilité (C·m ² V ⁻¹)
β	Angle de contact entre une particule et un liquide (°)
γ	Énergie de surface (J/m ²), tension de surface (J/m ²)
δ_n	Chevauchement normal entre deux particules (m)
δ_{n0}	Déformation finale subie par une particule (m)
δ_t	Déplacement total d'une particule dans la direction tangentielle (m)
$\delta_{t,max}$	Déplacement maximal d'une particule dans la direction tangentielle (m)
ε^n	Énergie caractéristique (J)
ε_0	Permittivité du vide (kg ⁻¹ m ⁻³ A ² s ⁴)
ε_0	Constante diélectrique (-)
η	Viscosité (Pa·s)

λ	Paramètre d'élasticité (-)
μ	Coefficient de friction (-), moment dipolaire (C·m)
μ_r	Coefficient de friction de roulement (-)
μ_s	Coefficient de friction statique (-)
$\mu_{s,w}$	Coefficient de friction statique avec la paroi (-)
μ_T	Paramètre de Tabor (-)
μ_w	Coefficient de friction avec la paroi (-)
ρ	Rayon de courbure (m), masse volumique (kg/m ³)
ϕ	Potentiel d'interaction entre deux particules (J)
ω	Vitesse angulaire (rad/s)

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

1.1 Définitions et concepts de base

Dans le domaine du génie chimique, les procédés nécessitant l'utilisation de matière particulaire sont nombreux et présents dans différentes sphères d'activités du milieu industriel (Bridgwater, 2003). Il est possible de les retrouver, entre autres, dans les domaines pharmaceutique, métallurgique et agroalimentaire (McCarthy & Ottino, 1998). De ce fait, il est crucial d'un point de vue économique et de contrôle-qualité de comprendre et de prévoir les dynamiques d'écoulement et de mélange de particules (Sato, Nakamura, & Watano, 2008).

Le comportement de la matière particulaire peut être très complexe à analyser (McCarthy, Jasti, Marinack, & Higgs, 2010). En effet, contrairement aux fluides dont le mouvement peut être décrit par les équations de Navier-Stokes, aucune équation constitutive n'a encore été établie pour les poudres. Par conséquent, un des moyens permettant de comprendre et de prévoir ce comportement est de procéder à des simulations informatiques à l'aide de méthodes numériques en utilisant des modèles appropriés pour calculer les forces de contact. Les méthodes numériques sont d'ailleurs de plus en plus populaires due à l'accroissement fulgurant des ressources informatiques depuis le début des années 1990. Une des méthodes les plus répandues et connues due à sa simplicité est, sans aucun doute, la méthode des éléments discrets (DEM), également nommée méthode des éléments distincts dans plusieurs ouvrages. Cette dernière a originalement été développée par Cundall et Strack (1979) à la fin des années 1970. Dans le but de permettre la modélisation numérique du mélange de poudres, l'unité de recherche sur les procédés d'écoulements industriels (URPEI) de l'École Polytechnique de Montréal a développé un code informatique utilisant la DEM, à l'aide du langage de programmation Fortran 90. Toutefois, ce programme ne permet pas d'inclure les forces de cohésion lors des simulations, limitant ainsi le type d'études de cas pouvant être réalisé.

1.2 Éléments de la problématique

1.2.1 Écoulements libres et écoulements cohésifs

Il est possible de classer le type d'écoulement de particules dans deux catégories différentes : l'écoulement libre et l'écoulement cohésif. Le premier type peut être décrit comme un système dont les forces en jeu sont les forces de contact et les forces externes telles que la gravité, la force de traînée, ainsi que la poussée d'Archimède. Le second type, c'est-à-dire l'écoulement cohésif, est caractérisé par la présence des mêmes forces que l'écoulement libre, mais avec l'ajout de forces cohésives causées par une adhésion de surface ou encore par des interactions interparticulaires. À titre d'exemple, il suffit de penser à la différence entre du sable sec et humide. En effet, les grains de sable secs s'écoulent facilement, contrairement aux grains humides qui collent les uns sur les autres.

Depuis le développement des méthodes numériques telles que la DEM, les simulations effectuées ont la plupart du temps été effectuées pour des écoulements libres (Alexander *et al.*, 2006; Cleary & Sawley, 2002; Faqih, Chaudhuri, Alexander, *et al.*, 2006), principalement à cause du manque de connaissances des différents mécanismes d'adhésion (entre des molécules différentes) et de cohésion (entre des molécules semblables). Par ailleurs, depuis les années 2000, l'intérêt croissant des chercheurs pour l'étude de ces mécanismes, la constante évolution de la puissance des ordinateurs, ainsi que le développement de grappes de serveurs puissantes permettant de répartir les calculs sur plusieurs processeurs ont favorisé le développement des connaissances dans ce domaine.

De plus, les forces cohésives peuvent être présentes dans diverses circonstances (voir la Section 2), et dans un milieu autant sec qu'humide. Celles-ci peuvent affecter considérablement les patrons d'écoulement et de mélange de la matière granulaire, de même que la ségrégation et la compaction des particules (Chaudhuri, Mehrotra, Muzzio, & Tomassone, 2006; Forsyth, Hutton, & Rhodes, 2002; Mehrotra, Chaudhuri, Faqih, Tomassone, & Muzzio, 2009; R. Yang, Zou, Dong, An, & Yu, 2007). En outre, lorsque celles-ci surpassent les forces externes telles que la gravité, il peut y avoir la formation d'agglomérats (Matuttis & Schinner, 2001). Par conséquent,

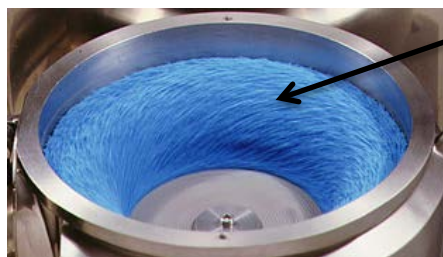
il est important de tenir compte de ces effets lors de la conception des équipements dans les procédés qui nécessitent l'utilisation de particules (Isabel Figueroa, Li, & McCarthy, 2009).

1.2.2 Motivation du projet de recherche

Dans le cadre des différentes activités de recherche de l'URPEI, il a été constaté que l'enrobage de particules d'un diamètre moyen de 1,2 mm par une couche mince d'un polymère de type polyacrylate d'éthyle/polyméthacrylate de méthyle (PEA/PMMA), connu sous le nom commercial EUDRAGIT NE 30D™, permet de modifier et de contrôler les forces d'adhésion entre les particules (Bouffard, Bertrand, Chaouki, & Giasson, 2012a). Plus particulièrement, l'effet drastique de deux paramètres a été observé expérimentalement :

1. La variation de la température ;
2. La variation de l'épaisseur de la couche de polymère.

Selon l'étude réalisée, il s'est avéré qu'une augmentation de température permet d'accroître les forces cohésives entre les particules. Par ailleurs, une augmentation de l'épaisseur de polymère favorise également la hausse des forces cohésives. Les manipulations ont été effectuées dans un sphéroniseur qui consiste en un équipement cylindrique dont la paroi circulaire du bas est en rotation. Un exemple de sphéroniseur en fonction est présenté à la figure 1-1.



Lit de particules
en rotation

Figure 1-1: Exemple de sphéroniseur en fonctionnement (LCI, 2012)

Dans le contexte d'écoulement de particules enrobées d'une couche polymérique, la cohésion est induite par l'interdiffusion des chaînes polymériques lors des contacts entre les particules, grâce à un mouvement de reptation. Le mécanisme général de ce type de cohésion peut être divisé en quatre étapes principales, illustrées à la figure 1-2.

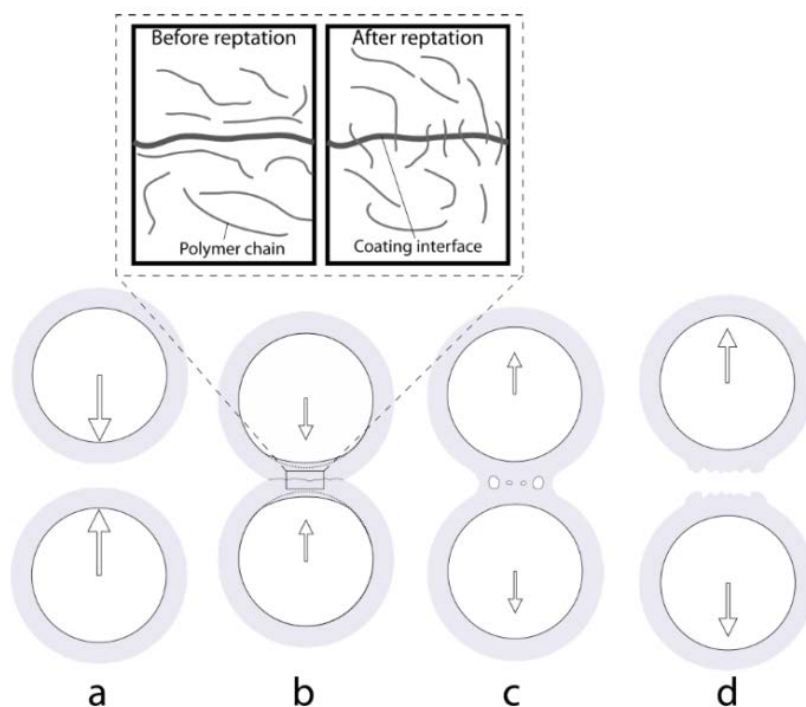


Figure 1-2: Cohésion de deux particules et diffusion des chaînes polymériques : a) Approche de deux particules; b) Interdiffusion des chaînes polymériques; c) Séparation des particules avec formation de cavités; d) Détachement complet (Bouffard, *et al.*, 2012a)

L'investigation expérimentale de ce système a été effectuée. Il a été démontré que l'évolution des forces de cohésion selon différentes épaisseurs de polymère ou valeurs de température a un impact significatif sur le patron d'écoulement des particules à l'intérieur du sphéroniseur. Dans un premier temps, il a été possible de constater une hausse du volume du lit de particules, suivant la croissance des forces cohésives, principalement due à la formation d'agglomérats. De même, quatre régimes d'écoulement distincts ont pu être identifiés et ceux-ci sont présentés à la figure 1-3 (pour plus de détails concernant les différents régimes, voir Bouffard *et al.* (2012b)).

Le premier régime (FS-I) est celui où aucune force cohésive n'est présente. L'écoulement s'effectue donc selon une géométrie toroïdale constante.

Ensuite, le second régime (FS-II) est caractérisé par la formation d'agglomérats de taille variable.

Le troisième régime (FS-III), quant à lui, est caractérisé par une division en deux de la géométrie toroïdale, de sorte que deux tores se forment et se superposent. De même, il est possible d'assister à un mouvement cyclique des formes toroïdales, c'est-à-dire qu'il y a la présence de fluctuations périodiques des deux tores. La température à laquelle il commence à y avoir la présence de ces deux géométries toroïdales est identifiée par T_{per} dans la figure 1-3.

Finalement, le quatrième régime (FS-IV) est celui où les forces de cohésion sont telles qu'elles surpassent toutes les autres forces présentes. Ainsi, les particules restent adhérentes les unes sur les autres et l'ensemble du tore se comporte comme une masse unique.

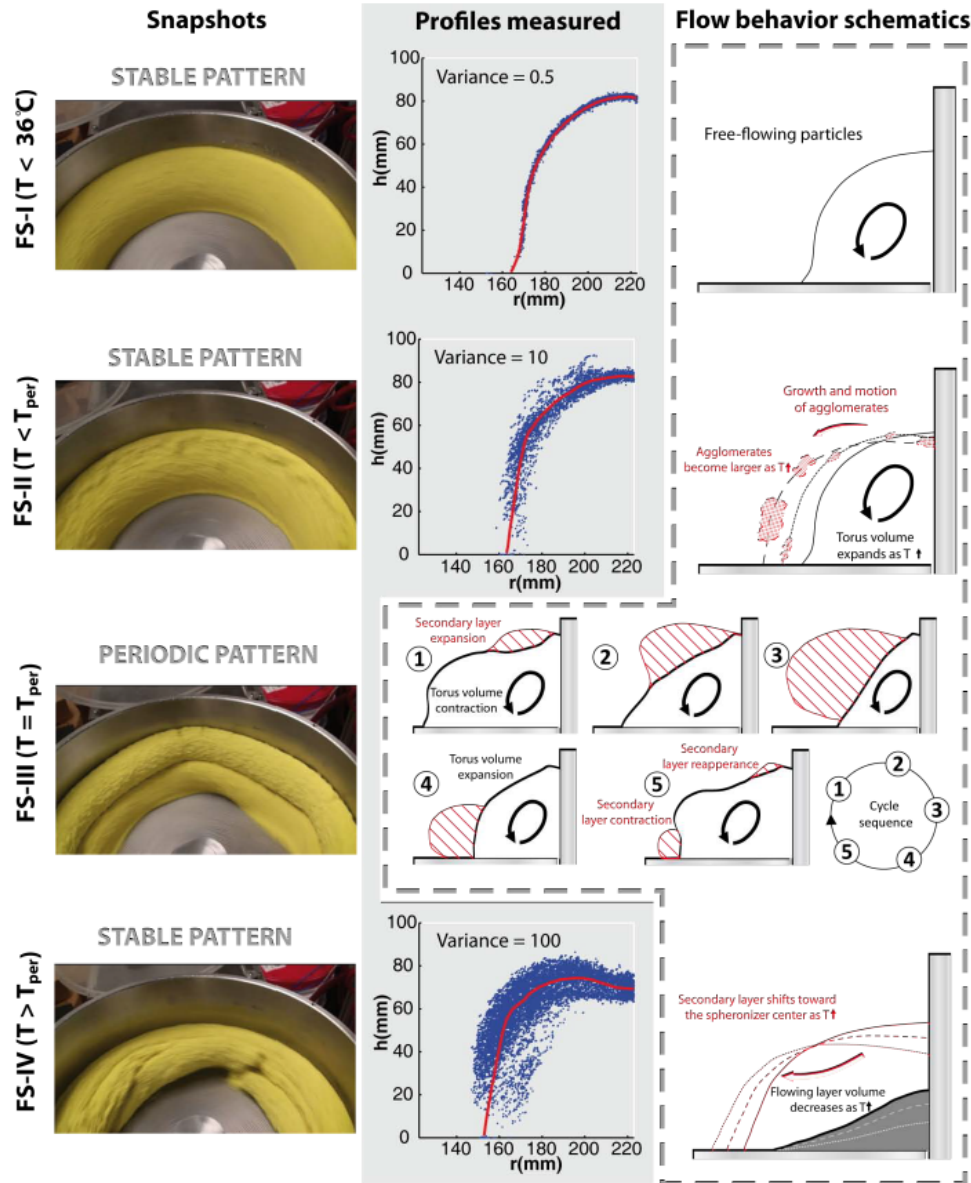


Figure 1-3: Les quatre régimes d'écoulement observés expérimentalement (Bouffard, *et al.*, 2012b)

Puisque la caractérisation expérimentale de ce type d'écoulement a déjà été effectuée, la suite de l'étude est de procéder à des simulations informatiques pour comprendre davantage la dynamique d'écoulement, ainsi que l'obtention d'outils supplémentaires permettant la caractérisation des différents régimes. Cependant, il est à ce jour impossible de procéder à ce genre de simulation, car aucun modèle de cohésion n'a été implanté dans le code DEM de l'URPEI.

1.3 Objectif général de recherche

L'objectif général de ce projet de recherche est d'effectuer la modélisation numérique d'écoulements de particules cohésives, par la méthode des éléments discrets.

1.4 Plan du mémoire

Tout d'abord, afin de permettre au lecteur de bien se situer par rapport au sujet, une revue de la littérature exposant l'état de l'art est présentée au chapitre 2. Dans cette section, la méthode des éléments discrets est décrite. Les différents types de forces cohésives entre les particules sont ensuite présentés. Dans un troisième temps, les modèles de cohésion pour les directions normales et tangentielles de la force de contact sont exposés. En outre, la méthode pour choisir judicieusement un modèle de cohésion pour la direction normale est présentée. Enfin, les méthodes possibles de vérification et d'évaluation de la précision sont présentées ainsi que les objectifs spécifiques.

La méthodologie est décrite au chapitre 3. Dans cette section, il est question du modèle de cohésion utilisé autant dans la direction normale que la direction tangentielle. De plus, la manière dont le modèle de cohésion global est implanté dans le code DEM est présentée. Les méthodes utilisées de vérification du code DEM et de l'étude du comportement des poudres cohésives sont aussi exhibées.

La discussion est contenue au chapitre 4, en ce qui concerne les tests de vérification du code DEM et des tests d'évaluation de la précision du code DEM modifié.

Enfin, le chapitre 5 conclut ce mémoire en présentant la synthèse des travaux ainsi que les limites et recommandations.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

En premier lieu, le fonctionnement de la méthode des éléments discrets est présenté. Dans cette partie, l'algorithme général est expliqué et les différents modèles non cohésifs permettant de calculer la force lors d'une collision entre des particules sont aussi présentés. Ensuite, une revue des différents types de forces cohésives est exposée. Dans un troisième temps, les principaux modèles de cohésion permettant d'effectuer la modélisation de particules cohésives sont présentés, autant pour la direction normale, que pour la direction tangentielle d'un impact particulaire. Des exemples de l'utilisation de ces modèles spécifiquement avec la DEM sont montrés. En outre, les moyens permettant de sélectionner judicieusement un modèle de cohésion sont décrits. Finalement, des méthodes de vérification et d'évaluation de la précision sont présentées.

2.1 Méthode des éléments discrets

Originellement développée par Cundall & Strack (1979), la DEM est une méthode numérique dont l'hypothèse principale est que la matière est constituée de particules discrètes indépendantes. Le fonctionnement de cette méthode est direct et relativement simple. Elle consiste à calculer la force totale que subit chaque particule puis d'intégrer deux fois l'équation du mouvement de Newton (éq. 2.1). Ceci permet d'obtenir la position et la vitesse de chaque particule à chaque itération en temps (Bertrand, Leclaire, & Levecque, 2005; Lemieux *et al.*, 2008).

$$\mathbf{F}_i = m_i \frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} \quad (2.1)$$

où \mathbf{F}_i , m_i , \mathbf{x}_i , sont respectivement la force totale, la masse et les coordonnées du centre de masse de la particule i . La rotation des particules est aussi considérée en calculant le couple :

$$\mathbf{T}_i = I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} \quad (2.2)$$

Où T_i , I_i , ω_i sont respectivement le couple, le moment d'inertie, ainsi que la vitesse angulaire de la particule i . Cependant, l'équation 2.2 est présentée uniquement à titre informatif, puisque la présente étude est concentrée uniquement sur l'analyse des contacts dans les directions normales et tangentielles.

L'algorithme général est divisé en quatre étapes principales pour chaque itération en temps, soit :

1. La détection des contacts ;
2. Le calcul des forces de contact pour chaque paire de particules ;
3. Le bilan de forces total ;
4. Le calcul de la nouvelle position pour chaque particule.

2.1.1 La détection des contacts pour des particules sphériques

Il y a détection d'un contact entre deux particules lorsque ces dernières se chevauchent dans la direction normale (δ_n). La méthode la plus aisée est de considérer des particules sphériques, puisque le chevauchement peut être calculé simplement en ayant les coordonnées du centre des particules. L'orientation de ces dernières lors de l'impact n'a donc pas d'importance, contrairement aux particules non sphériques :

$$\delta_n = \frac{R_1 + R_2 - \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}}{2} > 0 \quad (2.3)$$

Où δ_n est la distance de chevauchement normale, R_i est le rayon de la particule i et (x_i, y_i, z_i) sont les coordonnées du centre de masse de la particule i . La figure 2-1 illustre la détection d'un contact entre deux particules sphériques :

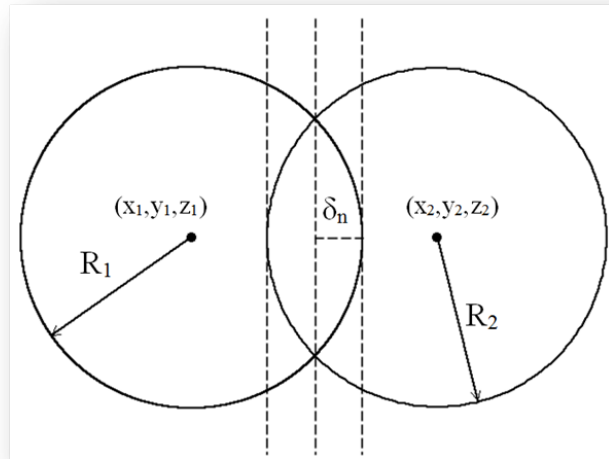


Figure 2-1: Détection d'un contact entre deux particules sphériques

2.1.2 Forces de contact lors d'une collision

Lors de la collision entre deux particules, la force de contact est décomposée selon les composantes normale et tangentielle :

$$\mathbf{F}_c = \mathbf{F}^N + \mathbf{F}^T \quad (2.4)$$

où \mathbf{F}_c est la force de contact entre deux particules, \mathbf{F}^N est la force normale et \mathbf{F}^T est la force tangentielle.

2.1.2.1 Force normale \mathbf{F}^N

Il existe quatre catégories de modèles pour la force normale : les modèles à *potentiel continu*, les modèles *viscoélastiques linéaires*, les modèles *viscoélastiques non linéaires*, ainsi que les modèles *hystérétiques* (Kruggel-Emden, Simsek, Rickelt, Wirtz, & Scherer, 2007).

Les modèles à *potentiel continu* permettent de calculer la force normale en combinant une force potentielle, ainsi qu'une force d'amortissement :

$$\mathbf{F}^N = \mathbf{F}_{pt}^N + \mathbf{F}_d^N \quad (2.5)$$

où \mathbf{F}_{pt}^N est la force normale potentielle et \mathbf{F}_d^N est la force normale d'amortissement et où la force normale potentielle peut être calculée par :

$$\mathbf{F}_{pt}^N = -\frac{d\phi}{dx_{ij}} \quad (2.6)$$

Le potentiel ϕ peut être calculé selon le potentiel de Lennard-Jones (Akiyama, Aoki, Iguchi, & Nishimoto, 1996; Aoki & Akiyama, 1995) :

$$\phi = \varepsilon \left[\left(\frac{D_e}{x_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{D_e}{x_{ij}} \right)^6 + \frac{1}{4} \right] \quad (2.7)$$

où ε est l'énergie caractéristique, D_e est la distance d'équilibre à laquelle le potentiel est nul et x_{ij} est la distance entre deux particules. La force normale d'amortissement \mathbf{F}_d^N est quant à elle dépendante et proportionnelle à la vitesse normale \mathbf{V}_n :

$$\mathbf{F}_d^N = C\mathbf{V}_n \quad (2.8)$$

Les modèles *viscoélastiques linéaires* permettent de calculer la force normale en combinant une force élastique et une force d'amortissement :

$$\mathbf{F}^N = \mathbf{F}_e^N + \mathbf{F}_d^N = k\boldsymbol{\delta}_n + C\mathbf{V}_n \quad (2.9)$$

où k est la constante de rappel du ressort. Les modèles *viscoélastiques non linéaires* sont similaires aux modèles *viscoélastiques linéaires* et proviennent majoritairement de la théorie de Hertz (Kruggel-Emden, *et al.*, 2007):

$$\mathbf{F}^N = \mathbf{F}_e^N + \mathbf{F}_d^N = k\boldsymbol{\delta}_n^{\frac{3}{2}} + C\mathbf{V}_n \quad (2.10)$$

La théorie de Hertz est la suivante :

$$\mathbf{F}_e^N = k\boldsymbol{\delta}_n^{\frac{3}{2}} \quad (2.11)$$

Ces derniers modèles sont largement utilisés dans la méthode des éléments discrets. On retrouve, entre autres, le modèle de Zhou *et al.* (2002) exprimé ci-dessous autant pour la force normale élastique que la force normale d'amortissement (Bertrand, *et al.*, 2005; Lemieux, *et al.*, 2008) :

$$\mathbf{F}_e^N = \frac{4}{3} E^* \sqrt{\delta_n^3} \mathbf{n} \quad (2.12)$$

$$\mathbf{F}_d^N = c_N (6m_{ij} E^* \sqrt{R^* \delta_n}) \mathbf{V}_n \quad (2.13)$$

où c_N est le coefficient d'amortissement normal, m_{ij} est la masse d'une particule, \mathbf{V}_n est la vitesse normale et E^* est le module d'Young réduit, c'est-à-dire :

$$E^* = \left(\frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2} \right)^{-1} \quad (2.14)$$

et où E_i et ν_i sont respectivement le module d'Young et le coefficient de Poisson du matériau i . R^* représente quant à lui le rayon réduit :

$$R^* = \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right)^{-1} \quad (2.15)$$

Les modèles *hystérétiques* ont été développés afin de tenir compte de la déformation plastique lors des collisions de particules. Un des plus connus est le modèle de Walton et Braun (1986) :

$$\mathbf{F}^N = k_1 \delta_n \quad \text{pour la compression} \quad (2.16)$$

$$\mathbf{F}^N = k_2 (\delta_n - \delta_{n_0}) \quad \text{pour la décompression} \quad (2.17)$$

où k_1 et k_2 sont des constantes de rappel différentes et δ_{n_0} est la déformation finale subie par la particule.

Les modèles les plus utilisés dans le cadre des simulations numériques avec la DEM sont les modèles *viscoélastiques linéaires* et *non linéaires*, puisqu'ils permettent de modéliser les forces de contact en considérant une contribution élastique ainsi qu'une contribution d'amortissement.

Les modèles à *potentiel continu* sont réputés ne pas être efficaces pour les simulations DEM et les modèles *hystérétiques* sont peu employés puisque leur précision semble grandement influencée par le type de matériau utilisé (Alizadeh, Bertrand, & Chaouki, 2013).

2.1.2.2 Force tangentielle

Malgré le fait que la contribution de la composante tangentielle est largement inférieure à celle de la composante normale (Antony, 2000) pour le calcul de la force totale, celle-ci est presque toujours présente dans le calcul des forces de contact. Un des modèles les plus utilisés dans la méthode des éléments discrets est celui de Mindlin & Deresiewicz (1952) :

$$\mathbf{F}_e^T = \frac{\mu_s |\mathbf{F}_e^N|}{|\boldsymbol{\delta}_t|} \left[1 - \left(1 - \left(\frac{\min(|\boldsymbol{\delta}_t|, \delta_{t,max})}{\delta_{t,max}} \right) \right)^{\frac{3}{2}} \right] \boldsymbol{\delta}_t \quad (2.18)$$

$$\mathbf{F}_d^T = c_T \left(6m_{ij} \mu_s |\mathbf{F}_e^N| \sqrt{\frac{1 - \frac{|\boldsymbol{\delta}_t|}{\delta_{t,max}}}{\delta_{t,max}}} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{V}_t \quad (2.19)$$

où \mathbf{F}_e^T est la force tangentielle élastique, \mathbf{F}_d^T est la force tangentielle d'amortissement, $\boldsymbol{\delta}_t$ est le déplacement total dans la direction tangentielle du point de contact, c_T est le coefficient d'amortissement tangentiell, μ_s est le coefficient de friction statique, $\delta_{t,max}$ est le déplacement maximal dans la direction tangentielle du point de contact et \mathbf{V}_t est la vitesse dans la direction tangentielle. Par ailleurs, le déplacement maximal $\delta_{t,max}$ est calculé de la manière suivante pour des particules ayant les mêmes propriétés (Kempton, Pinson, Chew, Zulli, & Yu, 2011) :

$$\delta_{t,max} = \mu_s \frac{2 - \nu}{2(1 - \nu)} \quad (2.20)$$

2.1.3 Bilan de forces

Lorsque les forces de contact sont calculées, le bilan de force peut être établi à partir de l'équation 2.1 et ce pour chaque particule afin de calculer l'accélération \mathbf{a} . La force totale qui agit sur une particule est composée de la somme des forces de contact qui agissent sur cette dernière ($\sum \mathbf{F}_c$), ainsi que les forces extérieures, telles que la poussée d'Archimède, la force de traînée et la gravité.

$$\mathbf{F}_{Archimède} + \mathbf{F}_{traînée} + \mathbf{F}_{gravité} + \sum \mathbf{F}_c = m\mathbf{a} \quad (2.21)$$

Où $\mathbf{a} = \frac{d^2\mathbf{x}_i}{dt^2}$ est l'accélération (voir éq. 2.1). Il est à noter que s'il y a présence d'une force cohésive, celle-ci peut être ajoutée aux forces extérieures dans le cas d'un champ de force, ou peut être directement comprise dans la force de contact s'il s'agit d'une force cohésive de contact. Afin de considérer la rotation, un bilan de moment angulaire est aussi effectué.

2.1.4 Calcul de la nouvelle position

Le bilan présenté dans la section 2.1.3 est effectué pour une valeur de temps précise. Cette valeur est incrémentée selon un pas de temps déterminé préalablement et la position ainsi que la vitesse de chaque particule peuvent être à nouveau calculées. Ainsi, la valeur du pas de temps est critique puisque la plus petite valeur possible est nécessaire afin de reproduire avec précision le comportement réel du système granulaire, c'est-à-dire de s'assurer que le profil de vitesse est adéquat et que tous les contacts entre les particules sont détectés. Cependant, plus le pas de temps est faible, plus le nombre d'itérations sera important, ce qui se traduira par un coût important en ressources informatiques. Il est donc essentiel de déterminer un pas de temps adéquat qui permet d'obtenir une précision acceptable et en limitant le plus possible le nombre de calculs nécessaires. Pour cela, une manière de procéder est d'avoir recours à un pas de temps Δt qui est plus petit que le temps caractéristique τ_c où le temps caractéristique est défini par le temps de contact moyen entre les particules lors d'une collision (Lemieux, *et al.*, 2008) :

$$\Delta t < \tau_c = R^* \sqrt{\frac{8\rho\pi^3}{E^*}} \quad (2.22)$$

où ρ est la densité d'une particule.

Ainsi, à chaque itération de temps, la seconde loi de Newton est intégrée deux fois afin d'obtenir la nouvelle position et la nouvelle vitesse de chaque particule. Puisque des millions d'itérations peuvent être nécessaires, il est essentiel d'utiliser des schémas d'intégration appropriés, telle que la méthode *Half-step leapfrog Verlet* (Bertrand, *et al.*, 2005; Fraige & Langston, 2004) :

$$v\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) = v\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) + a(t)\Delta t \quad (2.23)$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right)\Delta t \quad (2.24)$$

$$v(t + \Delta t) = v\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) + \frac{1}{2}a(t)\Delta t \quad (2.25)$$

où $x(t + \Delta t)$ et $v(t + \Delta t)$ sont respectivement la nouvelle position et la nouvelle vitesse.

2.2 Forces cohésives entre les particules

L'impact entre deux ou plusieurs particules peut résulter en une attrition ou coalescence selon la cinématique d'impact, la microstructure des particules et l'interaction interparticulaire (Lian, Thornton, & Adams, 1998). La cohésion causée par la force interparticulaire peut être classée dans deux catégories différentes, soit une cohésion dite « humide » ou « sèche ». La cohésion « humide » est causée par la présence de forces capillaires. En ce qui concerne la cohésion « sèche », celle-ci peut être causée par la force de Van der Waals et la force électrostatique. La figure 2.2 illustre les principales forces de cohésion entre les particules en fonction du diamètre particulaire et démontre bien l'importance de ces forces par rapport au poids particulaire.

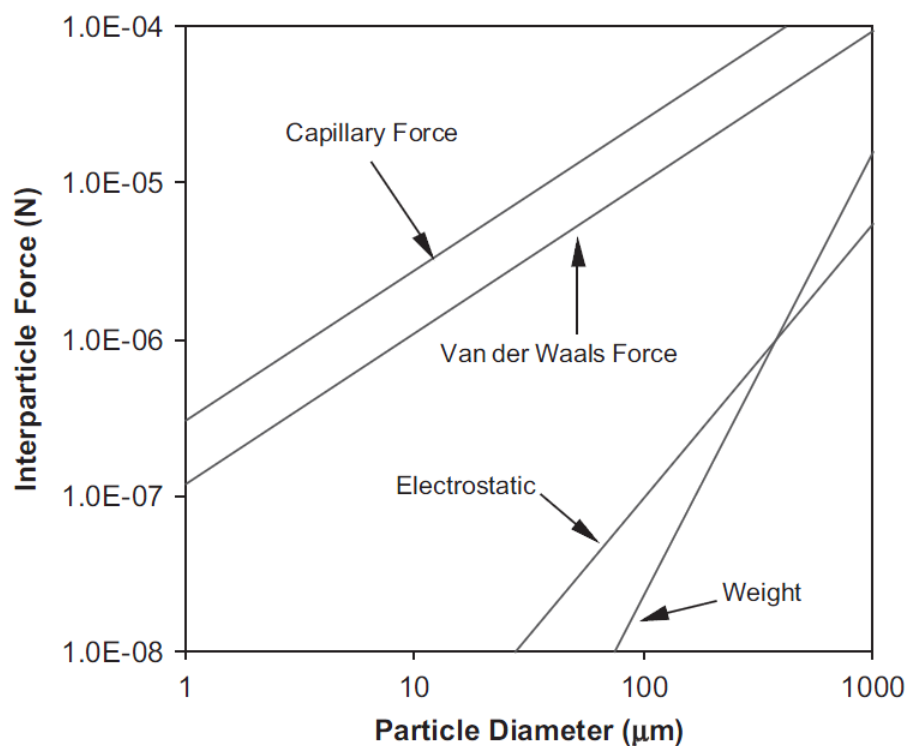


Figure 2-2: Forces cohésives en fonction du diamètre de particule (Zhu, Zhou, Yang, & Yu, 2007)

Par ailleurs, afin de caractériser l'importance des forces cohésives, le nombre adimensionnel de Bond est très souvent utilisé, ce dernier représentant le ratio des forces cohésives sur le poids des particules (Nase, Vargas, Abatan, & McCarthy, 2001) :

$$B_0 = \frac{F_{coh}}{mg} \quad (2.26)$$

où B_0 est le nombre de Bond, F_{coh} est la force adhésive et mg est le poids particulaire.

2.2.1 Cohésion « humide »

La cohésion dite « humide » peut être caractérisée par la présence de forces capillaires entre les particules, causée par la présence d'un liquide entre ces dernières. En effet, la présence de forces capillaires en plus de la tension de surface du liquide créera un pont liquide (Lian, Thornton, & Adams, 1993). Par ailleurs, tel qu'illustré à la figure 2-3, il n'est pas nécessaire qu'il y ait un contact physique entre deux particules pour la formation d'un pont liquide (Muguruma, Tanaka, & Tsuji, 2000).

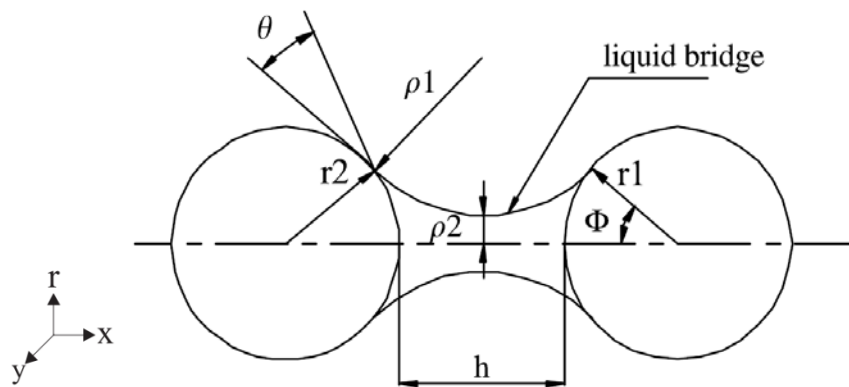


Figure 2-3: Exemple de pont liquide (S. C. Yang & Hsiau, 2001)

La géométrie d'un pont liquide peut être très complexe et il est possible de procéder selon deux approches afin de calculer tous les paramètres, soit celle de l'approximation toroïdale de Fisher (1926) ou encore selon la solution exacte de l'équation de Laplace-Young (S. C. Yang & Hsiau, 2001). Ces approches sont présentées plus en détail dans la section 2.3.5.

2.2.2 Cohésion « sèche »

Tel qu'illustré à la figure 2-2, les forces capillaires sont les plus dominantes en fonction du diamètre particulaire. Cependant, en l'absence d'un agent liquide, les forces cohésives peuvent être causées par les forces de Van der Waals ou par les forces électrostatiques lorsque la taille de la particule se situe environ entre 5 nm et 5 µm. Lorsque la taille de la particule se situe sous 5 nm, les interactions sont davantage dominées par le mouvement Brownien et lorsque la taille est plus élevée que 5 µm, les forces interparticulaires sont dominées par les forces mécaniques externes (visqueuse, inertie, gravité) (Hong, 1997).

2.2.2.1 Force de Van der Waals

La force de Van der Waals, nommée ainsi pour honorer le travail du physicien hollandais Johannes Diderik van der Waals, peut être présente entre plusieurs combinaisons de molécules et de surfaces.

2.2.2.1.1 Forces de Van der Waals entre les molécules

Cette force est causée par la présence d'interactions dipolaires provenant de trois origines différentes :

- Interaction de Keesom (phénomène d'orientation)

$$E_K = -\frac{\mu_1^2 \mu_2^2}{3(4\pi\epsilon_0)^2 k_B T D^6} \quad (2.27)$$

où E_K est l'énergie potentielle d'interaction entre deux molécules, μ_i est le moment dipolaire, ϵ_0 est la permittivité du vide, $k_B T$ est l'énergie thermique et D est la distance entre les deux molécules.

- Interaction de Debye (phénomène d'induction)

$$E_D = -\frac{\mu_1^2 \alpha_2 + \mu_2^2 \alpha_1}{3(4\pi\epsilon_0)^2 D^6} \quad (2.28)$$

où α est la polarisabilité.

➤ Forces de dispersion de London (phénomène de dispersion)

$$E_L = -\frac{3}{2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{(4\pi\epsilon_0)^2 D^6} \frac{h\nu_1 \nu_2}{(\nu_1 + \nu_2)} \quad (2.29)$$

où h est la constante de Planck et ν est la fréquence.

L'énergie potentielle de Van der Waals peut être obtenue en additionnant les trois contributions précédentes :

$$E_{VdW} = -\frac{1}{D^6} \left[\frac{\mu_1^2 \mu_2^2}{3(4\pi\epsilon_0)^2 k_B T} + \frac{\mu_1^2 \alpha_2 + \mu_2^2 \alpha_1}{3(4\pi\epsilon_0)^2} + \frac{3}{2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{h\nu_1 \nu_2}{(\nu_1 + \nu_2)} \right] \quad (2.30)$$

La force totale peut être obtenue en dérivant l'équation précédente par la distance D .

$$F_{VdW} = -\frac{1}{6D^7} \left[\frac{\mu_1^2 \mu_2^2}{3(4\pi\epsilon_0)^2 k_B T} + \frac{\mu_1^2 \alpha_2 + \mu_2^2 \alpha_1}{3(4\pi\epsilon_0)^2} + \frac{3}{2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{h\nu_1 \nu_2}{(\nu_1 + \nu_2)} \right] \quad (2.31)$$

où F_{VdW} est la force de Van der Waals (N).

2.2.2.1.2 Forces de Van der Waals entre objets macroscopiques

Afin de calculer les forces de Van der Waals pour des entités de taille plus imposante que des molécules, il est possible de procéder avec l'approche d'Hamaker, selon laquelle la force totale est la sommation des interactions dipolaires entre les molécules formant l'entité. Ainsi, l'énergie potentielle est exprimée de la manière suivante :

$$E_{VdW} = -\frac{A_H R^*}{6D} \quad (2.32)$$

où A_H est la constante d'Hamaker. Cette valeur varie habituellement entre 10^{-19} et 10^{-20} joules.

Selon la même approche que précédemment, il est possible d'obtenir la force en dérivant par la distance entre les deux entités :

$$F_{vdw} = -\frac{A_H R^*}{6D^2} \quad (2.33)$$

Pour des particules de même taille, on peut réécrire l'équation précédente sous la forme suivante :

$$F_{vdw} = -\frac{A_H R}{12D^2} \quad (2.34)$$

Pour des particules de tailles différentes, l'équation est de la forme suivante :

$$F_{vdw} = -\frac{A_H R_1 R_2}{(R_1 + R_2)6D^2} \quad (2.35)$$

De plus, on considère habituellement des particules sphériques pour le calcul des forces, car il est très difficile d'obtenir la distance D entre des particules non sphériques puisqu'elle dépend de l'orientation de ces dernières.

2.2.2.1.3 Force électrostatique

La force électrostatique peut être présente entre deux particules. Selon la loi de Coulomb, cette force peut être calculée de la manière suivante (Kuniaki, Hiroaki, Shuji, & Ko, 2006) :

$$F_{EC} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{D^2} \quad (2.36)$$

Où ϵ_0 est la constante diélectrique du milieu et q_1 et q_2 représentent la charge des deux particules.

2.2.3 Travail d'adhésion et énergie de surface

Puisque l'adhésion entre les surfaces est intimement liée aux propriétés des matériaux qui les composent, le travail thermodynamique d'adhésion et l'énergie de surface sont souvent utilisés pour quantifier la cohésion entre celles-ci (Lee, Kang, & Kwon, 2008; Wu & You, 2007) :

$$W = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12} \quad (2.37)$$

où W est le travail d'adhésion, γ_1 et γ_2 représentent l'énergie de surface des matériaux 1 et 2, et γ_{12} est l'énergie interfaciale entre les deux surfaces. Lorsque les deux surfaces sont identiques, l'équation 2.37 se réduit à :

$$W = 2\gamma \quad (2.38)$$

Le tableau 2.1 indique des valeurs typiques d'énergie de surface.

Substance	Énergie de surface (mJ/m ²)
Polyéthylène - PE	32,4
Polyméthylméthacrylate - PMMA	40,2
Polystyrène - PS	40,6
Cuivre	1360
Graphite	1250
Plomb	442
Nickel	1770
Argent	890
Glycérol	64,0
Eau	72,2

Tableau 2.1: Valeurs typiques d'énergie de surface (TWI, 2013)

2.3 Modèles de cohésion pour la direction normale

Afin de pouvoir modéliser les contacts particuliers avec présence de forces cohésives, quelques modèles ont été développés à partir de la seconde moitié du vingtième siècle. Les principaux sont respectivement les modèles de Bradley, JKR et DMT. Un aperçu des autres modèles sera aussi présenté à la fin de cette section.

2.3.1 Bradley

2.3.1.1 Description du modèle de Bradley

Le modèle de Bradley consiste à calculer les forces de Van der Waals entre les particules. Si nous considérons deux particules qui entrent en collision, la force normale élastique est calculée de la manière suivante :

$$F_e^N = -\frac{16\pi\gamma R}{3} \left[\left(\frac{D_e}{D} \right)^2 - \frac{1}{4} \left(\frac{D_e}{D} \right)^8 \right] \quad (2.39)$$

où γ est l'énergie de surface et D_e est la distance d'équilibre à laquelle les forces d'attraction sont égales aux forces de répulsion.

2.3.1.2 Utilisation du modèle de Bradley dans la DEM

Ce modèle ne considère pas la déformation élastique lors des collisions entre les particules, c'est-à-dire que les deux particules sont considérées totalement rigides. À cause de cela, il n'est jamais utilisé dans les simulations avec la méthode des éléments discrets, puisqu'il ne représente pas adéquatement la réalité (Li, Marshall, Liu, & Yao, 2011).

2.3.2 JKR

2.3.2.1 Description du modèle JKR

Le modèle JKR, développé par Johnson, Kendall, & Roberts (1971), est sans contredit un des modèles de cohésion les plus utilisés. Celui-ci constitue un ajout au modèle d'Hertz (éq. 2.11), afin de tenir compte de l'énergie de surface des matériaux. Ce modèle fait l'hypothèse que la déformation d'une particule lors d'un impact sera plus importante qu'avec le modèle d'Hertz, à cause de la présence de l'énergie de surface (éq. 2.38). Ceci est représenté aux figures 2-4 et 2-5. De plus, il est considéré que la force cohésive n'agit seulement qu'au point de contact.

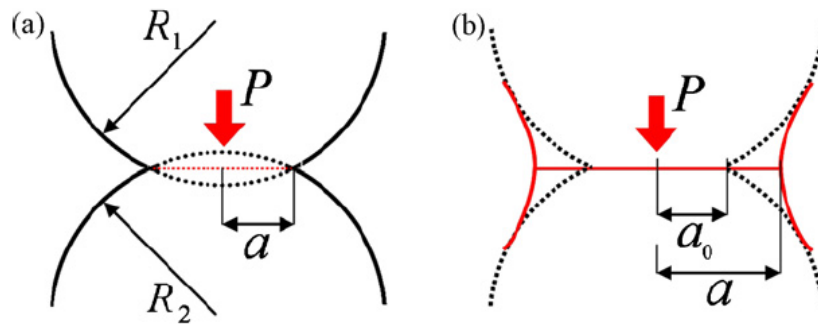


Figure 2-4: Collision de deux particules : (a) contact selon le modèle de Hertz, (b) contact selon le modèle JKR (Lee, *et al.*, 2008)

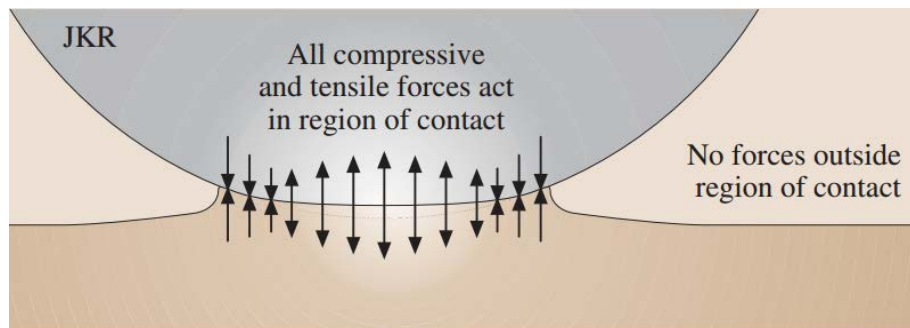


Figure 2-5: Modèle JKR (Bharat, 1998; Lee, *et al.*, 2008)

Les arcs de cercle de la figure 2-4b indiquent que selon un contact le modèle JKR, le rayon de contact entre les particules sera plus important.

Le rayon de contact initial a_0 correspond à une force de contact nulle :

$$a_0 = \left(\frac{9\pi W R^{*2}}{2E^*} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.40)$$

où W est le travail d'adhésion. Suite à la collision, le rayon de contact a est exprimé de la manière suivante :

$$a^3 = \frac{3R^*}{4E^*} \left(F_e^N + 3\pi W R^* + \sqrt{6\pi W R^* F_e^N + (3\pi W R^*)^2} \right) \quad (2.41)$$

Lorsque la valeur du travail d'adhésion est nulle, l'équation est réduite de sorte que le modèle original de Hertz est obtenu [$a^3 = \frac{3R^*}{4E^*} (F_e^N)$]. Le chevauchement entre les particules est calculé par :

$$\delta_n = \frac{a^2}{R^*} - \sqrt{\frac{2\pi W a}{E^*}} \quad (2.42)$$

La force normale élastique est calculée selon l'équation suivante :

$$F_e^N = \frac{4E^* a^3}{3R^*} - \sqrt{8\pi W E^* a^3} \quad (2.43)$$

De plus, il existe une force de retrait entre les deux particules. Suite à une collision de deux particules, les particules resteront collées ensemble si la force est inférieure à la force de retrait (« pull-off force ») :

$$F_p = -\frac{3}{2}\pi W R^* \quad (2.44)$$

Ainsi, suite à une collision entre deux particules, la force cohésive est toujours présente même lorsque le chevauchement entre celles-ci devient nul. Il est possible de visualiser les différentes étapes d'une collision entre deux particules cohésives à la figure 2-6.

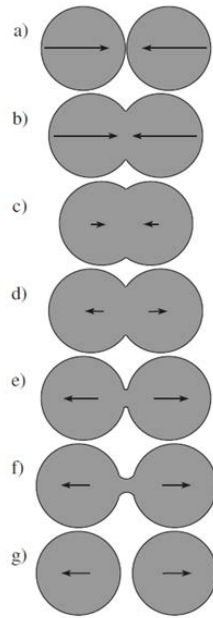


Figure 2-6: Collision de deux particules avec cohésion (Brilliantov, Albers, Spahn, & Poschel, 2007)

Telles qu'illustrées à la figure 2-6, les particules restent liées entre elles suite à une collision jusqu'à ce que la force normale soit supérieure à la force de retrait.

2.3.2.2 Utilisation du modèle JKR dans la DEM

Le modèle JKR a été utilisé dans un nombre important de simulations à l'aide de la méthode des éléments discrets, puisqu'il est relativement aisé de l'implanter dans un code informatique. Un des problèmes est que le calcul du rayon de contact a (voir éq. 2.42) est différent selon la valeur du travail d'adhésion (Lee, *et al.*, 2008). La valeur du rayon peut être mesurée directement avec un microscope (Lee, *et al.*, 2008). Autrement, puisqu'il s'agit d'une fonction non linéaire (éq. 2.45), cette valeur peut aussi être calculée en utilisant la méthode de Newton (éq. 2.46).

$$a = f(W, E^*, R^*, \delta_n) \quad (2.45)$$

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (2.46)$$

Le tableau 2.2 présente certains exemples de simulations effectuées avec le modèle JKR implanté dans un code DEM.

Simulations DEM	Auteurs
Influence de la cohésion sur les propriétés macroscopiques d'un lit de particules	Iordanoff, Seve, & Berthier (2002)
Bris d'agglomérats lors d'impact sur mur	Moreno, Ghadiri, & Antony (2003)
Cisaillement d'une mince couche de particules cohésives	Iordanoff, Fillot, & Berthier (2005)
Analyse de la fluidité d'écoulement de particules cohésives	Morenoatanasio, Antony, & Ghadiri (2005)
Simulation du comportement de particules lors du freinage d'un camion	Zuo, Xu, Yang, & Feng (2006)
Fluidité de poudre compacte cohésive	Hassanpour & Ghadiri (2007)
Formation d'agglomérats sur un mur	Marshall (2007)
Déposition de particules sur une fibre cylindrique	S. Q. Li & Marshall (2007)
Granulation dans un lit fluidisé	Kafui & Thornton (2008)
Écoulement de particules dans un jet aérosol	Marshall (2009)
Ségrégation et mélange dans un mélangeur rotatif	Isabel Figueroa, <i>et al.</i> (2009)
Utilisation de particules Janus pour contrôler le mélange et la ségrégation de particules cohésives dans un mélangeur rotatif	Figueroa & McCarthy (2010)
Dispersion aérodynamique d'agglomérats de particules	Calvert, Hassanpour (2011)
Quantification des interactions cohésives lors de la collision de deux particules et de deux nuages de particules	Kosinski & Hoffmann (2011)
Impact d'une particule sur une surface plate	Liu, Li, & Yao (2011)

Tableau 2.2: Exemples de simulations effectuées avec le modèle JKR implanté dans un code DEM

Enfin, il est à noter qu'aucun ouvrage ou article ne fait une référence directe à la manière dont la portion d'amortissement est calculée.

2.3.3 DMT

2.3.3.1 Description du modèle DMT

Le modèle DMT a été établi peu de temps après le modèle JKR par Derjaguin, Muller & Toporov (1975). Ce modèle requiert aussi l'énergie de surface des matériaux (éq. 2.38), mais contrairement au modèle JKR, il est considéré que la force cohésive est présente en dehors de la zone de contact seulement. Au point de contact, les contraintes et déformations sont calculées par la théorie de Hertz. Par conséquent, la force normale élastique est constituée d'une superposition entre la force répulsive de Hertz et une force cohésive constante.

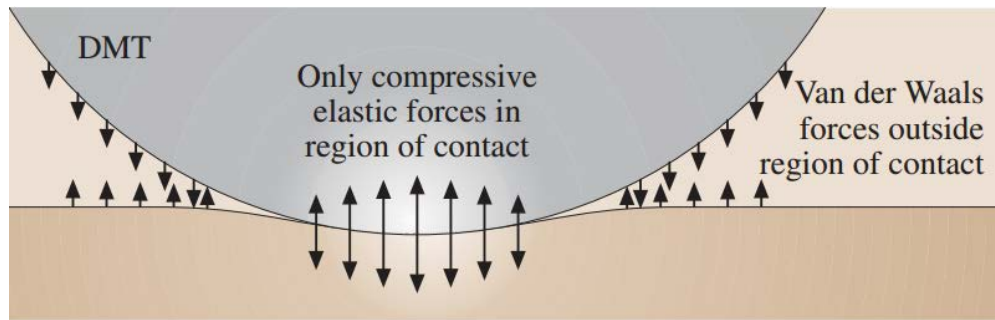


Figure 2-7: Modèle DMT (Bharat, 1998)

Les équations permettant de calculer les différents paramètres lors des collisions sont similaires à ceux du modèle JKR, mais comportent quelques différences. Lorsque la force de contact est nulle, le rayon est donné par :

$$a_0 = \left(\frac{3\pi W R^{*2}}{2E^*} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.47)$$

Le chevauchement est calculé par :

$$\delta_n = \frac{a^2}{R^*} \quad (2.48)$$

La force normale élastique est :

$$F_e^N = \frac{4E^*a^3}{3R^*} - 2\pi WR^* \quad (2.49)$$

Enfin, la force de retrait (« pull-off force ») est calculée de la manière suivante :

$$F_p = 2\pi WR^* \quad (2.50)$$

2.3.3.2 Utilisation du modèle DMT dans la DEM

Selon la littérature, aucune simulation à l'aide de la méthode des éléments discrets n'a été effectuée avec le modèle DMT. Cependant, il est possible de trouver quelques études portant sur les différences et la transition entre le modèle DMT et le modèle JKR. Par exemple, Shi & Zhao (2004) étudient la différence entre les modèles JKR, DMT et le modèle de Hertz pour résoudre des problèmes impliquant des contacts de l'ordre de la nanoseconde, Prokopovich & Perni (2011) comparent les modèles JKR et DMT pour la prédiction de forces adhésives entre des surfaces couvertes d'aspérités et Liechti, & Ravi-Chandar (2007) vérifient la transition entre les modèles DMT et JKR.

2.3.4 DLVO

2.3.4.1 Description du modèle DLVO

La théorie DLVO (Derjaguin & Landau, 1941; Verwey & Overbeek, 1948) a été développée pour considérer les interactions et l'agglomération entre les particules contenues dans un liquide. Ce modèle combine les forces de Van der Waals selon la théorie d'Hamaker, ainsi que la répulsion de la double couche électrostatique calculée avec l'équation de Poisson-Boltzmann :

$$F_T = F_{VdW} + F_{EC} \quad (2.51)$$

où F_T est la force nette totale. F_{VdW} est la force de Van der Waals et F_{EC} est la force électrostatique. La figure 2-8 démontre bien l'énergie nette en fonction de la distance.

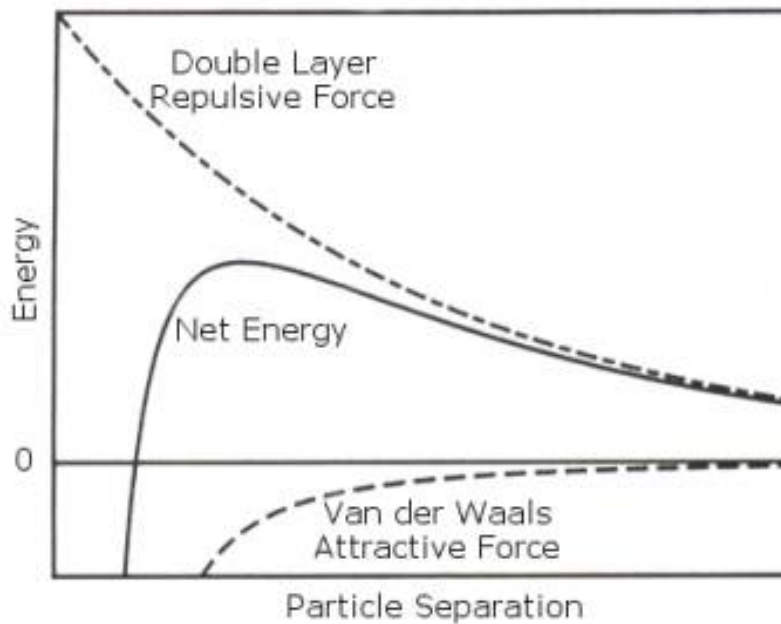


Figure 2-8: Énergie en fonction de la distance pour le modèle DLVO (Malvern, 2013)

Le modèle DLVO s'applique particulièrement pour les forces de longue portée (distance entre les particules plus grande que $0,3 \text{ nm}$). Pour les forces de courte portée (distance entre les particules plus petite que $0,3 \text{ nm}$) ou pour l'adhésion de surface, ce modèle n'est pas adéquat (Hong, 1997).

2.3.4.2 Utilisation du modèle DLVO dans la DEM

Le modèle DLVO a été très peu utilisé en ce qui concerne les simulations à l'aide de la méthode des éléments discrets. Par ailleurs, l'utilisation de la théorie d'Hamaker pour calculer les forces de Van der Waals peut causer de sérieux problèmes puisqu'il y aura une singularité numérique au contact de deux corps solides, c'est-à-dire qu'il y aura une division par zéro dans l'équation permettant de calculer les forces de Van der Waals ($D \rightarrow 0$ dans éq. 2.34 et 2.35). Pour éliminer ce problème, la méthode JKR peut être utilisée, afin d'estimer les forces de Van der Waals (Chu-

Wan, 1998; Hong, 1997). Voici les exemples recensés en ce qui concerne l'utilisation de la méthode DLVO dans la DEM (tableau 2.3) :

Simulations DEM	Auteurs
Interaction des particules dans une substance colloïdale	Chu-Wan (1998) Hong (1997)
Simulation du bris d'agglomérats dans un écoulement de fluide visqueux	Higashitani, Iimura, & Sanda (2001)

Tableau 2.3: Exemples de simulations effectuées avec le modèle DLVO implanté dans un code DEM

2.3.5 Forces capillaires et ponts liquides

2.3.5.1 Description des modèles utilisés pour les forces capillaires et ponts liquides

Les simulations d'écoulements de particules humides ou encore contenues dans un liquide sont la plupart du temps effectuées avec l'implémentation de ponts liquides ou seulement de forces capillaires. En effet, un pont liquide est constitué de deux forces, soit la force capillaire qui contribue directement à la cohésion entre deux particules, ainsi qu'une force visqueuse supplémentaire, causée par la présence de liquide entre les particules (McCarthy, 2003).

$$F_{PL} = F_{cap} + F_v \quad (2.52)$$

où F_{PL} est la force totale du pont liquide, F_{cap} est la force capillaire et F_v est la force visqueuse influencée par la viscosité du fluide dans lequel sont contenues les particules. Il est à noter que dans certaines études, seule la force capillaire est considérée comme force cohésive.

2.3.5.1.1 Solution exacte de l'équation de Laplace-Young

L'équation de Laplace-Young est une équation non linéaire aux dérivées partielles, permettant de calculer la différence de pression ΔP entre deux surfaces séparées par un fluide (éq. 2.53)

$$\Delta P = \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (2.53)$$

où γ est la tension de surface du fluide et où R_1 et R_2 sont des rayons de courbure.

Par ailleurs, la force capillaire entre deux particules peut être calculée de la manière suivante :

$$F_{cap} = 2\pi\gamma a \sin(\phi) \sin(\phi + \theta) + \pi a^2 \Delta P \sin^2(\phi) \quad (2.54)$$

où ϕ est l'angle de demi-remplissage et θ est l'angle de contact entre le pont liquide et la particule. Il est possible de visualiser les angles ϕ et θ à la figure 2-9.

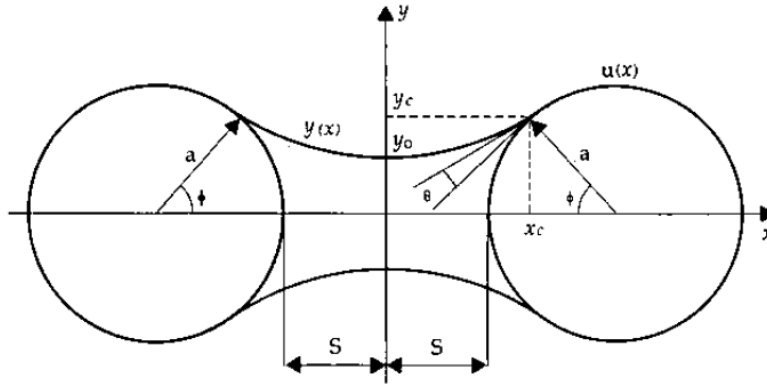


Figure 2-9: Exemple de pont liquide (Lian, *et al.*, 1993)

Afin de calculer Δp il n'est pas possible de résoudre analytiquement l'équation de Laplace-Young, car le calcul des rayons de courbure peut s'avérer compliqué, selon la géométrie du pont liquide et des propriétés du fluide (Lian, *et al.*, 1993). Pour pallier à cette situation, la corrélation de Mikami peut être utilisée. Celle-ci s'avère être une méthode largement utilisée puisqu'elle établit concrètement la relation entre la force, le volume du pont liquide, l'angle de contact, ainsi que la distance entre les particules (Anand, Curtis, Wassgren, Hancock, & Ketterhagen, 2009). Pour des particules de mêmes dimensions, la force capillaire s'exprime par :

$$F_{cap} = \pi\gamma R \left[e^{\left(\frac{D}{R} + B \right)} + C \right] \quad (2.55)$$

et où les constantes de régression A , B , C sont :

$$A = -1,1 \left(\frac{V}{R^3} \right)^{0,53} \quad (2.56)$$

$$B = \left(-0,34 \ln \left(\frac{V}{R^3} \right) - 0,96 \right) \beta^2 - 0,0019 \ln \left(\frac{V}{R^3} \right) + 0,48 \quad (2.57)$$

$$C = 0,0042 \ln \left(\frac{V}{R^3} \right) + 0,078 \quad (2.58)$$

où γ est la tension de surface, β est l'angle de contact entre le liquide et la particule, R est le rayon d'une particule, V est le volume de liquide, D est la distance entre deux particules et A , B , C sont les constantes de régression. La force visqueuse peut quant à elle être calculée de la manière suivante (Adams & Perchard, 1985) :

$$F_v = 6\pi\eta R^* v_n \frac{R^*}{D} \quad (2.59)$$

où η est la viscosité du liquide, R^* est le rayon réduit et v_n est la vitesse relative entre les particules.

2.3.5.1.2 Approximation toroïdale de Fisher

Une seconde méthode, souvent utilisée due à sa simplicité est l'utilisation de l'approximation toroïdale de Fisher (S. C. Yang & Hsiau, 2001) :

$$F_{cap} = \pi\gamma\rho_2 \left(\frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1} \right) \quad (2.60)$$

où γ est la tension de surface et ρ_1 et ρ_2 sont des rayons de courbure spécifiques au pont liquide illustrés en deux dimensions à la figure 2-3. Il est à noter que ρ_1 est dans le plan r-x et que ρ_2 est dans le plan r-y. La force visqueuse F_v peut quant à elle être calculée de la même manière qu'avec la solution exacte de l'équation de Laplace-Young.

2.3.5.2 Utilisation des forces capillaires et des ponts liquides dans la DEM

Un nombre important de simulations ont été effectuées avec la DEM (tableau 2.4) :

Simulations DEM	Auteurs
Phénomène de coalescence lors de l'impact de deux agglomérats de particules	Lian, <i>et al.</i> (1998)
Simulation de poudre cohésive dans un lit fluidisé	Mikami, Kamiya, & Horio (1998)
Écoulement de particules dans un granulateur	Muguruma, <i>et al.</i> (2000)
Déplacement de particules dans un lit vibrant	Yang & Hsiau (2001) Hsiau & Yang (2003)
Effet de la force cohésive sur les caractéristiques de l'écoulement de matériel granulaire	Forsyth, <i>et al.</i> (2002)
Mesure de la cohésion dans les systèmes granulaires humides	Groger, Tuzun, & Heyes (2003)
Investigation des effets de la cohésion sur le mélange et la ségrégation de particules	McCarthy (2003)
Garnissage de particules humides	Yang, Zou, & Yu (2003b)
Comportement contrainte-déformation et fatigue de matériel granulaire cohésif	Delenne, El Youssoufi, Cherblanc, & Bénet (2004)
Cohésion dans les écoulements gaz-solide	Jain, Shi, & McCarthy (2004)
Effets d'infiltration de liquide interstitiel sur les mécanismes de dispersion des agglomérats de particules	Gopalkrishnan, Manaszloczower, & Feke (2005)
Pulsations gazeuses pour contrer la défluidisation	Wang & Rhodes (2005)
Contact adhésif entre des particules possédant un revêtement	Mary, Chateauminois, & Fretigny (2006)
Étude d'un système granulaire polydisperse avec présence de ponts liquides	Soulié, Cherblanc, El Youssoufi, & Saix (2006)
Ségrégation de particules cohésives dans un lit vibrant	Yang (2006)
Comportement mécanique de particules cohésives de terre	Zhang & Li (2006)
Développement d'un modèle pour l'analyse de particules de terre humide	El Shamy & Gröger (2008)
Développement d'un modèle pour des systèmes granulaires cohésifs polydisperses	Richefeu, El Youssoufi, Peyroux, & Radjaï (2008)
Décharge de particules humides cohésives contenues dans une trémie	Anand, Curtis, Wassgren, Hancock, & Ketterhagen (2009)
Interaction entre des agglomérats de particules dans un écoulement laminaire	Grof, Cook, Lawrence, & Štěpánek (2009)
Mélange de systèmes granulaires monodisperses humides dans un mélangeur à pales	Remy, Khinast, & Glasser (2012)

Tableau 2.4: Exemples de simulations effectuées avec des ponts liquides implantés dans un code DEM

2.3.6 Autres modèles pour la direction normale

2.3.6.1 Modèle de Luding

Le modèle linéaire de Luding (2005) se basant sur le principe d'un ressort, a été développé pour tenir compte de la déformation plastique irréversible lors d'un contact entre les particules, ainsi que de la cohésion. Lors du chargement initial entre deux particules, la force augmente linéairement jusqu'à ce qu'elle atteigne $F_{N,max}$, ce qui correspond à un chevauchement de δ_{max} (trajectoire OA). Par la suite, lors du déchargement (ou d'un rechargement), la force diminue (ou augmente) selon un taux de variation différent, puisqu'il y a une perte d'énergie par déformation plastique. Celle-ci diminue jusqu'à un chevauchement de δ_{min} dont la force correspondante est $F_{N,min}$ (trajectoire AB). Enfin, lorsque le chevauchement est plus petit que δ_{min} , la trajectoire suivie est BO (Stefan Luding, 2008). L'image 2-10 illustre bien ce concept.

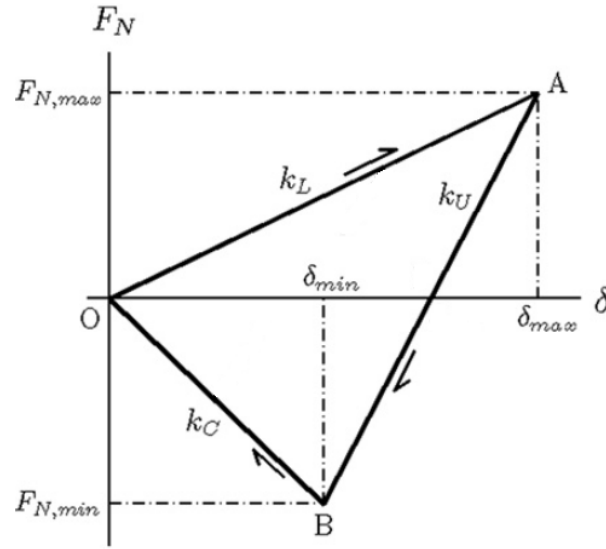


Figure 2-10: Illustration du modèle de Luding (Sarkar & Wassgren, 2010)

$$k = \begin{cases} k_L & \text{pour } 0 < \delta < \delta_{max} & \text{(chargement)} \\ k_U & \text{pour } \delta_{min} < \delta < \delta_{max} & \text{(déchargement/rechargement)} \\ k_C & \text{pour } 0 < \delta < \delta_{min} & \text{(déchargement)} \end{cases} \quad (2.61)$$

où les k_L et k_U sont les coefficients de raideur du ressort, k_C est un coefficient de raideur de cohésion et δ est le chevauchement entre deux particules. Des exemples d'utilisation du modèle de Luding pour la DEM sont présentés au tableau 2.5.

Simulations DEM	Auteurs
Tests de cisaillement biaxial	Luding (2005)
Étude de diverses propriétés telles que la friction et la cohésion	Luding (Stefan Luding)
Interaction entre poudres ultrafines	Tykhoniuk, <i>et al.</i> (2007)
Propagation du son dans un système granulaire cohésif	Mouraille, Herbst, & Luding (2009)
Mélange en continu de particules cohésives	Sarkar & Wassgren (2010)
Différentes approches pour la simulation du mélange de particules	Dubey, Sarkar, Ierapetritou, Wassgren, & Muzzio (2011)
Étude de la contrainte maximale d'un mélange granulaire dans une géométrie Couette	Stefan Luding & Alonso-Marroquín (2011)

Tableau 2.5: Exemples de simulations effectuées avec le modèle de Luding implanté dans un code DEM

2.3.6.2 Modèle d'Hamaker

Le modèle d'Hamaker présenté dans la section 2.2.2.1.2 est aussi utilisé dans quelques études pour prendre en considération les forces de Van der Waals. L'équation peut être implantée directement dans la méthode des éléments discrets (Aarons, Sun, & Sundaresan, 2009; Dong, Zou, Yang, Yu, & Roach, 2009; Jia, Zhang, Chen, & He, 2011; Johno, Satomi, Nakashima, Shigematsu, & Ono, 2009; Limtrakul, Rotjanavijit, & Vatanatham, 2007; Moon, Kevrekidis, & Sundaresan, 2006; R. Y. Yang, Zou, & Yu, 2003a; Ye, van der Hoef, & Kuipers, 2004). Par contre, tel que mentionné précédemment, l'implantation de ce modèle cause un problème puisque si la distance entre deux particules devient nulle, c'est-à-dire au moment du contact, il y a une division par zéro, ce qui est évidemment impossible. Pour pallier à ce problème, il est habituellement convenu que lorsque la valeur de la distance est très faible, de l'ordre de 10^{-10} , alors la force de Van der Waals devient constante, ce qui n'est pas tout à fait juste (Tatemoto, Mawatari, & Noda, 2005).

De plus, pour les particules dont la taille atteint l'ordre du millimètre, il a aussi été proposé de calculer les forces de Van der Waals pour des particules de tailles inférieures et ensuite de procéder à une mise à l'échelle (Shuai *et al.*, 2011; Tatemoto, *et al.*, 2005). Voici un exemple de de Tatemoto, *et al.* (2005) pour la mise à l'échelle des forces de Van der Waals entre des particules de $6\text{ }\mu\text{m}$ et 1 mm :

$$F_{VdW}(d_p=1mm) = F_{VdW}(d_p=6\mu m) \frac{m_{(d_p=1mm)}g}{m_{(d_p=6\mu m)}g} \quad (2.62)$$

où m et d_p sont respectivement la masse et le diamètre d'une particule.

2.3.6.3 Utilisation directe du nombre de Bond

Tel que mentionné à la section 2.2, le nombre de Bond est le ratio entre la force cohésive et le poids d'une particule. On peut réécrire ce ratio afin d'exprimer la force cohésive en fonction du poids de la particule et du nombre de Bond :

$$F_{coh} = B_0 \cdot mg \quad (2.63)$$

Ainsi, en imposant différentes valeurs de B_0 , il est possible de calculer directement la force cohésive associée et d'insérer cette valeur directement dans le bilan total des forces (Kant Pandit, Wang, & Rhodes, 2007; H. Li & McCarthy, 2003; Jai Kant Pandit, Wang, & Rhodes, 2005; J. K. Pandit, Wang, & Rhodes, 2006; Rhodes, Wang, Nguyen, Stewart, & Liffman, 2001a, 2001b). Cependant, l'utilisation de cette méthode est dénuée de toute signification physique.

2.4 Modèle de cohésion pour la direction tangentielle

La présence de forces cohésives affecte également les forces tangentielles entre les particules (Severson, Keer, Ottino, & Snurr, 2009). Un des modèles utilisés pour modéliser la contribution tangentielle est le modèle de Thornton (1991), qui provient entre autres du modèle de Mindlin & Deresiewicz et des travaux de Savkoor & Briggs (1977). Ce modèle a la particularité qu'il sépare le contact tangentiel en deux étapes. En effet, à cause de la présence de forces cohésives, il y aura d'abord un phénomène de « pelage » entre les deux particules jusqu'à une certaine force tangentielle critique. Dépassée la force critique, il y pourra y avoir glissement entre les deux particules.

Par ailleurs, juste avant l'étape de « pelage », la présence d'une force tangentielle causera un microdéplacement tangentiel dans la zone de contact. Par conséquent, la force tangentielle est calculée par l'équation suivante, du contact initial, jusqu'à ce que l'étape de « pelage » soit terminée :

$$F^T = 8G^*a\delta_t \quad (2.64)$$

où G^* est le module de cisaillement réduit, a est le rayon de contact (voir fig. 2-4) et δ_t est le déplacement qui correspond au micro glissement entre deux particules. Le module de cisaillement réduit se calcule de la manière suivante :

$$\frac{1}{G^*} = \frac{2 - \nu_1}{G_1} + \frac{2 - \nu_2}{G_2} \quad (2.65)$$

où les ν_i sont les coefficients de Poisson et les G_i sont les modules de cisaillement. La force tangentielle critique est la suivante :

$$F_c^T = \sqrt{\frac{(F_e^N F_p + (F_p)^2) G^*}{E^*}} \quad (2.66)$$

où F_e^N est la force normale élastique, F_p est la force de retrait calculée avec le modèle JKR (voir éq. 2.44) et E^* est le module d'Young réduit. À partir de la force critique, la force tangentielle est

calculée de deux manières différentes, en fonction de l'amplitude de la force normale. Dans le premier cas, si $F_e^N < -0,3F_p$:

$$F^T = \mu P' \left(1 - \frac{P' - F_e^N}{3P'} \right) \quad (2.67)$$

où μ est le coefficient de friction. L'expression P' est la suivante :

$$P' = F_e^N + 2F_p + 2\sqrt{F_e^N F_p + (F_p)^2} \quad (2.68)$$

Dans un deuxième temps, si $F_e^N > -0,3F_p$, l'expression de la force tangentielle est à la suivante :

$$F^T = -\mu(F_e^N + 2F_p) \quad (2.69)$$

Ce modèle semble être le plus utilisé en ce qui concerne les simulations DEM (Hassanpour & Ghadiri, 2007; Moreno, *et al.*, 2003; Zuo, *et al.*, 2006). Cependant, la contribution tangentielle par rapport à la force totale de contact et la validation de ce modèle semble ne pas faire encore l'unanimité en 2012. En effet, on compte beaucoup plus de modèles développés pour la direction normale du contact entre deux particules. Le modèle basé directement sur les travaux de Savkoor et Briggs a aussi été employé à quelques reprises (Isabel Figueroa, *et al.*, 2009; I. Figueroa & McCarthy, 2010). En outre, le modèle présenté précédemment ne concerne que la portion élastique. La portion d'amortissement n'est jamais discutée ou presque dans les ouvrages qui ont été consultés.

2.5 Sélection judicieuse d'un modèle de cohésion en modélisation numérique

Afin de sélectionner de manière judicieuse un modèle de cohésion pour des fins de simulations numériques, un premier critère μ_T a été établi par Tabor (1977) permettant de faire un choix entre les modèles JKR (section 2.3.2) et DMT (section 2.3.3) :

$$\mu_T = \left(\frac{R^* W^2}{E^{*2} z_0^3} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.70)$$

où R^* est le rayon réduit, W est le travail d'adhésion, E^* est le module d'Young réduit et z_0 est la distance d'équilibre entre les deux surfaces. Ce critère représente le rapport entre la déformation normale élastique et la portée (distance) des forces cohésives à la distance d'équilibre z_0 .

Par ailleurs, le modèle DMT s'applique généralement pour des petites particules dont la force cohésive est minime, alors que le modèle JKR convient davantage pour des particules plus grosses et dont la cohésion est plus importante.

Afin de sélectionner un modèle avec plus de précision, il est possible d'utiliser un « plan d'adhésion ». Il suffit de calculer les valeurs selon les axes X et Y, c'est-à-dire le paramètre d'élasticité $\lambda = 1,16\mu_T$ et le ratio de la force de déformation sur la force cohésive, pour ensuite se situer à l'endroit approprié selon le couple (X,Y) obtenu. Les premiers à introduire un tel plan furent Johnson & Greenwood (1997). Celui-ci est illustré à la figure 2-11 :

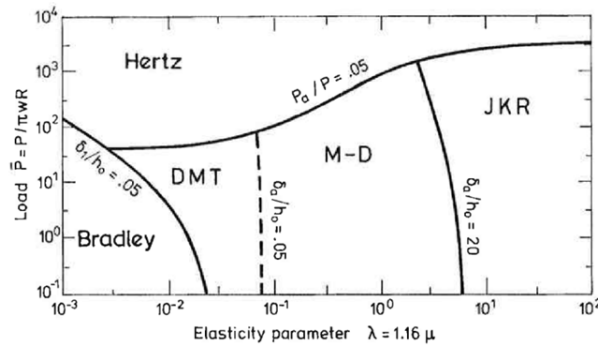


Figure 2-11: Plan d'adhésion de Johnson & Greenwood (1997)

Le paramètre d'élasticité λ est équivalent à 1,16 fois le paramètre μ_T et peut être calculé à l'aide de :

$$\lambda = 1,16\mu_T = \frac{2}{h_0} \left(\frac{W^2 R^*}{\pi K^2} \right)^{1/3} \quad (2.71)$$

où $h_0 = 0,97z_0$ avec z_0 la distance d'équilibre (entre 0,2 et 0,4 nm), $W = 2\gamma$ est le travail requis pour séparer les deux surfaces, μ_T est calculé à partir de l'équation 2.70, et $K = \frac{4}{3}E^*$ avec E^* le module de Young réduit. Un second plan a été établi par Liu, Li, & Yao (2010), qui inclut davantage de modèles (fig. 2-12) :

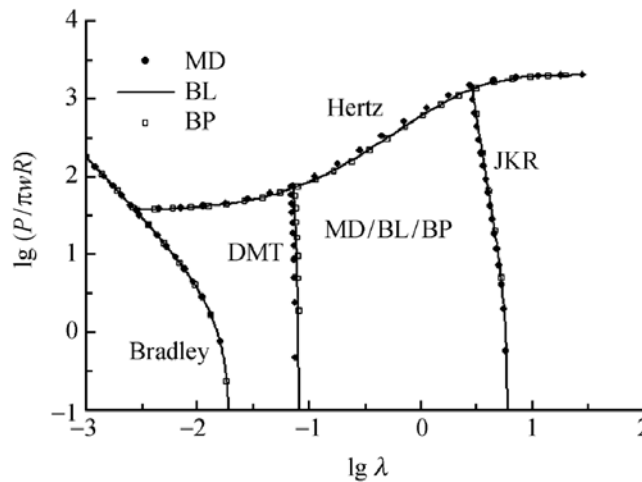


Figure 2-12: Plan d'adhésion de Liu *et al.* (2010)

Afin de déterminer un modèle de cohésion, il suffit de calculer les valeurs selon l'axe des abscisses et selon l'axe des ordonnées et ensuite de se positionner à l'endroit approprié sur un des deux graphiques présentés aux figures 2-11 et 2-12. Les deux plans d'adhésion sont similaires à la différence que celui de Liu *et al.* (2010) comporte davantage de modèles. Par ailleurs, il est à noter que les modèles MD, BL et BP sont respectivement les modèles *Maugis-Dugdale*, *Barthel-Linear* et *Barthel-Parabolic*. Ceux-ci ne sont pas présentés dans le présent ouvrage, car ils ne sont pas utilisés dans les travaux concernant la DEM et sont très peu présents dans la littérature pour ce qui concerne la modélisation numérique. Enfin, ces plans d'adhésion ne concernent que les modèles pour la direction normale de la force de contact.

2.6 Vérification et évaluation de la précision

Lors du développement d'un programme informatique permettant la simulation de situations réelles d'écoulements de particules, il est essentiel de différencier l'étape de vérification de celle d'évaluation de la précision. En premier lieu, la vérification permet de s'assurer que le programme informatique fait bien ce qu'on lui demande. Ensuite, l'évaluation de la précision permet de s'assurer que les résultats des simulations sont cohérents, particulièrement de manière qualitative.

2.6.1 Vérification

Peu d'articles discutent de l'importance de l'étape de vérification. En effet, si les résultats des simulations ne sont pas concluants, est-ce que cela est dû à un modèle mathématique non approprié ou bien à une simple « coquille » dans le code ? Asmar *et al.* (2002) et Chung & Ooi (2011) proposent quelques tests simples afin de s'assurer que le code informatique est exempt d'erreurs. Ces tests simples peuvent être effectués avec une ou quelques particules. Par exemple, un des tests consiste à laisser tomber une particule à partir d'une hauteur quelconque déterminée, en conservant seulement la force normale élastique et la force de gravité. Ainsi, au contact avec la paroi en dessous de la particule, l'énergie sera complètement restituée et la particule remontera exactement à la hauteur de départ. Ce cycle se reproduira indéfiniment. Ensuite, d'autres tests peuvent être effectués, avec ou sans amortissement, avec plusieurs particules, en retirant la gravité et en faisant varier la position horizontale de la ou des particule(s) avec une hauteur fixe, etc. L'avantage de cette méthode de vérification est qu'elle est directe et ne demande pas nécessairement de calculs analytiques pour vérifier la validité des résultats obtenus. Plus de détails sont disponibles concernant ces tests au chapitre 3.

2.6.2 Évaluation de la précision

Dans la plupart des études sur les systèmes granulaires, cohésifs ou non cohésifs, l'étape d'évaluation de la précision s'effectue en comparant les données obtenues par simulation avec les résultats expérimentaux. Par exemple, une des méthodes les plus utilisées est le calcul de l'angle de repos statique (Y. J. Li, Xu, & Thornton, 2005). Pour ce faire, des particules sont d'abord disposées sur une plateforme horizontale. Ensuite, ces dernières s'écoulent à travers un orifice de taille variable, situé au milieu de la plateforme. Plus les forces cohésives entre les particules seront élevées, plus l'angle statique augmentera. Différentes expériences d'angles de repos statiques sont présentées aux figures 2-13 et 2-14. La figure 2-13 illustre des résultats expérimentaux, alors que la figure 2-14 illustre des résultats obtenus par DEM.

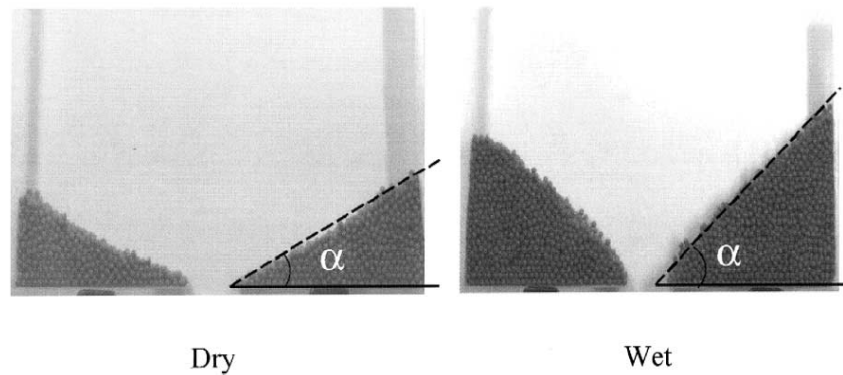


Figure 2-13: Exemples d'angles statiques obtenus par Nase, *et al.* (2001). L'image de gauche représente des particules dont les forces cohésives sont absentes. L'image de droite représente des particules humides avec la présence de forces capillaires

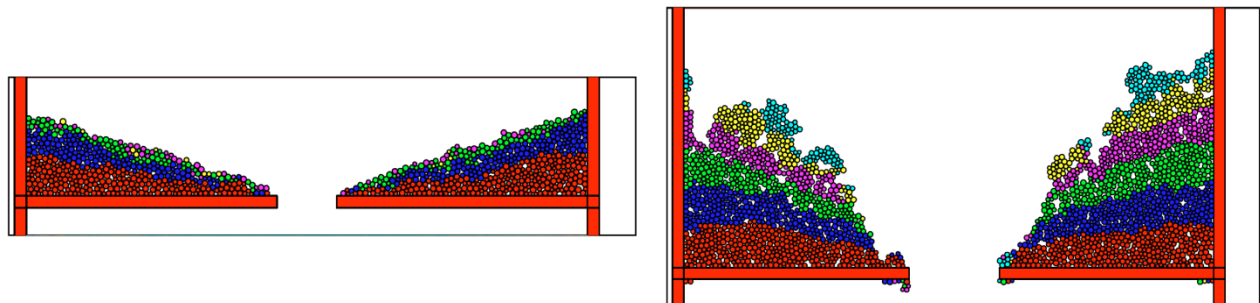


Figure 2-14: Exemples d'angles statiques obtenus par Matuttis & Schinner (2001). L'image de gauche représente des particules dont les forces cohésives sont faibles. L'image de droite représente des particules dont les forces cohésives sont élevées

Cependant, un des problèmes avec ce type d'expérience est la possibilité de colmatage de l'orifice. En effet, si les forces cohésives sont trop élevées, l'écoulement à travers l'orifice cessera complètement. La figure 2-15 est un exemple de simulation DEM de Matuttis & Schinner (2001). Lors de cette simulation, ils augmentent la force cohésive de sorte que l'écoulement cesse complètement.

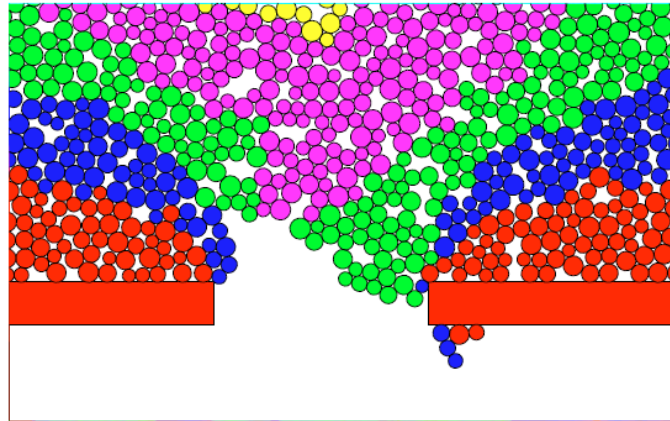


Figure 2-15: Orifice colmaté à cause de forces cohésives trop importantes (Matuttis & Schinner, 2001)

Par ailleurs, peu d'auteurs présentent leurs résultats de manière à ce qu'il soit aisé de les comparer, c'est-à-dire que l'augmentation de l'angle de repos est présentée en fonction de l'humidité au lieu d'être présentée en fonction du nombre de Bond. L'utilisation du nombre de Bond, tel que fait par Nase, *et al* (2001) et par Chen, Jallo, Quintanilla, & Dave (2010), permet une comparaison adéquate, puisque le type de cohésion n'importe pas du tout. En outre, selon les travaux de Nase, *et al* (2001), il est convenu qu'un changement radical a lieu au niveau de l'angle de repos lorsque la force de cohésion atteint la même valeur que le poids particulaire ($Bo = 1$).

Une autre façon de valider les résultats obtenus, particulièrement dans les systèmes granulaires, consiste à analyser l'expansion de volume en fonction de l'augmentation de la force cohésive. En effet, la présence de cette force aura pour effet d'augmenter la porosité dans le lit de particules (Alexander, *et al.*, 2006; Faqih, Chaudhuri, Alexander, *et al.*, 2006; Faqih, Chaudhuri,

Muzzio, *et al.*, 2006; R. Yang, *et al.*, 2007). Par ailleurs, les résultats sont souvent présentés selon le degré de dilatation du lit de particules. La figure 2-16 illustre un exemple de résultats expérimentaux obtenus.

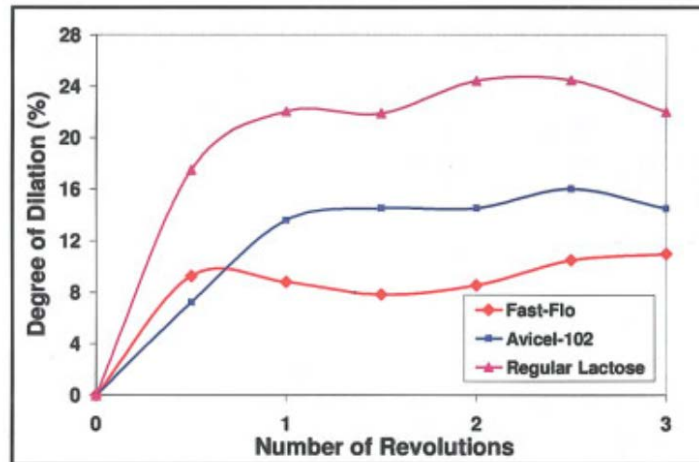


Figure 2-16: Exemple de résultats expérimentaux de dilatation de volume de poudres cohésives, dans un mélangeur rotatif, en fonction du nombre de révolutions (Faqih, Chaudhuri, Muzzio, *et al.*, 2006)

Le degré de dilatation de volume est donné par :

$$\% \text{ dilatation} = \frac{(\text{volume final} - \text{volume initial})}{\text{volume initial}} \cdot 100 \quad (2.72)$$

L'analyse du débit lors de la vidange d'une trémie dans laquelle sont contenues des particules cohésives peut aussi être effectuée. Par exemple, Anand, *et al.* (2009) ont introduit un coefficient adimensionnel de décharge (CAD) :

$$CAD = \frac{\text{Débit de décharge en présence de cohésion}}{\text{Débit de décharge en l'absence de cohésion}} \quad (2.73)$$

Ensuite, il est possible de visualiser les résultats du coefficient adimensionnel de décharge en fonction du nombre de Bond (résultats expérimentaux) :

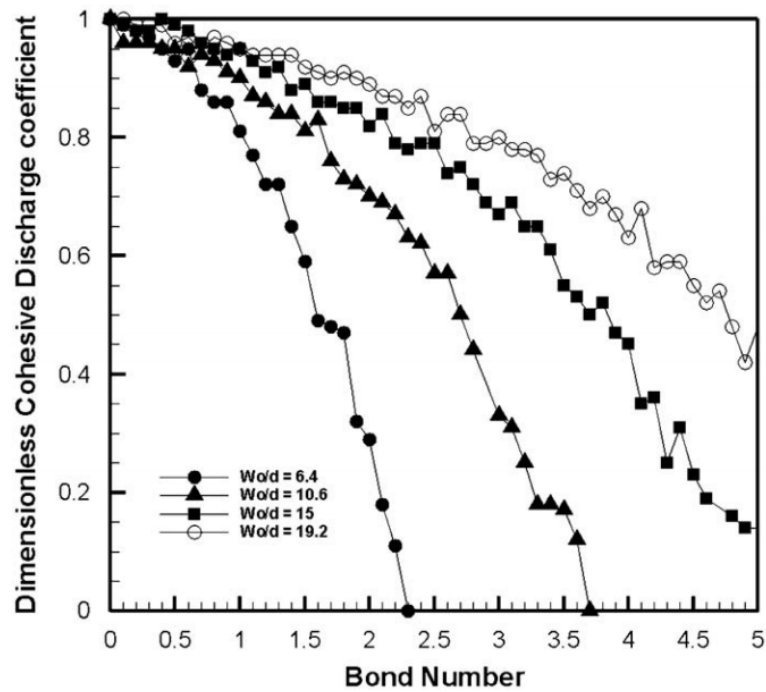


Figure 2-17: Différentes valeurs du coefficient adimensionnel de décharge en fonction du nombre de Bond (Anand, *et al.*, 2009)

Finalement, il existe d'autres méthodes de validation telles que l'utilisation de la vélocimétrie par imagerie de particules (Remy, *et al.*, 2012) et la comparaison de profils de surface libre (Corwin, 2008).

2.7 Objectifs spécifiques

Lors de la revue de littérature, la méthode des éléments discrets a été présentée. Ensuite, il a été question de la nature des forces cohésives entre des particules solides. Dans un troisième temps, les modèles de cohésion pour les directions normale et tangentielle ont été présentés. Il a ensuite été question de la méthode afin de choisir judicieusement un modèle de cohésion. Enfin, les méthodes de vérification du code informatique et d'évaluation de la précision ont été présentées.

En outre, aucune simulation DEM n'a été à ce jour effectuée à l'URPEI, puisque les forces cohésives n'étaient pas incluses dans le modèle de force utilisé. Ainsi, la modification du code informatique pour tenir compte des forces cohésives et la modélisation numérique de particules avec ce type de forces est une première au département de génie chimique de l'École Polytechnique de Montréal.

Par conséquent, les objectifs spécifiques de ce projet de maîtrise sont donc de :

- Démontrer l'augmentation de l'angle de repos statique en fonction des forces cohésives ;
- Démontrer l'expansion de volume due aux forces cohésives à l'intérieur du sphéroniseur.

CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE

En premier lieu, la manière dont le modèle de cohésion a été sélectionné est présentée. Ensuite, il est question de l'implantation de ce modèle dans le code DEM original. Dans un troisième temps, la méthode de vérification du nouveau code DEM est présentée. Enfin, les méthodes de validation des résultats obtenus suite aux simulations informatiques sont exhibées.

3.1 Modèle de cohésion utilisé

3.1.1 Direction normale

3.1.1.1 Force élastique

Afin de sélectionner le modèle de cohésion pour la direction normale et pour la portion élastique, le plan d'adhésion de Liu, *et al.* (2010) fut utilisé. Celui-ci, présenté à la figure 3-1 a été considéré plutôt que le plan de Johnson & Greenwood (1997) puisqu'il est plus récent, mais le second aurait de toute manière donné le même résultat. Pour procéder avec le plan d'adhésion, des données de travail d'adhésion W (éq. 2.38) étaient requises pour calculer le paramètre d'élasticité λ . En collaboration avec le département de chimie de l'Université de Montréal, il a été possible d'effectuer des tests à l'aide d'un *SFA* (« Surface Force Apparatus ») afin de calculer la force de retrait entre deux surfaces possédant chacune une épaisseur de polymère de 70 nm. La technique consiste à approcher deux surfaces jusqu'à ce qu'elles soient en contact et ensuite de les séparer. La force de retrait est calculée et il est possible de déterminer le travail d'adhésion en isolant W dans l'équation 2.44. Ceci a été effectué avec le même polymère utilisé lors des travaux de Bouffard, *et al.* (2012a). Puisque les forces cohésives de ce type de polymère augmentaient selon la température, les tests *SFA* ont été effectués en faisant varier celle-ci de 12 à 58 degrés Celsius. Les valeurs de travail d'adhésion obtenues sont de l'ordre du mJ/m^2 .

Ensuite, il a été possible de calculer les paramètres du plan d'adhésion de Liu, *et al.* (2010) pour déterminer le modèle de cohésion à utiliser (éq. 3.1 et 3.2) :

$$\log\left(\frac{P}{\pi W R^*}\right) \quad (3.1)$$

$$\log(\lambda) \quad (3.2)$$

où P est la force de compression entre les surfaces en contact, W est le travail d'adhésion, R est le rayon des surfaces et λ est le paramètre d'élasticité calculé à partir du critère de Tabor μ_T présenté avec les équations 2.70 et 2.71 et où $\lambda = 1,16\mu_T$. Les valeurs des paramètres utilisés pour calculer les équations 3.1 et 3.2 sont présentées au tableau 3.1 :

Paramètres	Valeur
P	0,9 mN
W	variable
R^*	1,5 cm
E^*	110 MPa
z_0	0,2 nm

Tableau 3.1: Valeurs utilisées pour sélectionner un modèle approprié à partir du plan d'adhésion

Ainsi, plusieurs couples de valeurs ont été calculés pour les équations 3.1 et 3.2. Le tableau 3.2 illustre un exemple de valeurs obtenues.

Paramètres	Valeur
$\log\left(\frac{P}{\pi W R}\right)$	-0,52
$\log(\lambda)$	8,50

Tableau 3.2: Valeurs obtenues pour sélectionner un modèle approprié à partir du plan d'adhésion

Selon le couple obtenu, il est clair en se positionnant sur la figure 3-1 que le modèle de cohésion approprié est JKR. Par ailleurs, ceci fut le cas pour chaque couple calculé.

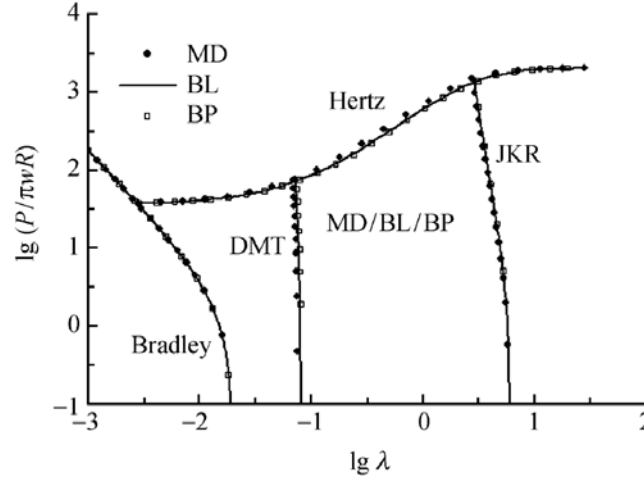


Figure 3-1: Plan d'adhésion pour le choix du modèle de cohésion à utiliser pour la direction normale

Les valeurs obtenues justifient donc l'utilisation du modèle JKR, afin d'introduire les forces de cohésion dans les simulations avec la méthode des éléments discrets. Il est aussi important de spécifier que le choix entre l'utilisation d'un modèle cohésif ou non cohésif sera dicté majoritairement par le rapport entre la force de compression versus l'importance de la force cohésive. Par ailleurs, le choix entre les différents modèles cohésifs sera dicté majoritairement par le paramètre d'élasticité.

3.1.1.2 Force d'amortissement

En ce qui concerne la force normale d'amortissement \mathbf{F}_d^N , l'approche utilisée est la même qu'avec le modèle de (Zhou, *et al.*, 2002), c'est-à-dire que la force d'amortissement est égale à un coefficient d'amortissement $C_n(\delta_n)$ multiplié par la vitesse instantanée dans la direction normale :

$$\mathbf{F}_d^N = C_n \left(6E^* a m \left(1 - \frac{\sqrt{8\pi E^* W a R^{*2}}}{4E^* a^2 - \sqrt{2\pi E^* W a R^{*2}}} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{V}_n \quad (3.3)$$

Malheureusement, l'analyse de la force normale d'amortissement n'a pas pu être effectuée dans le cadre de ce projet et par conséquent celle-ci ne sera pas détaillée. Par ailleurs, le développement de cette force en présence de cohésion est très peu discuté dans la littérature, voire absent.

3.1.2 Direction tangentielle

Il existe peu de modèles qui considèrent la contribution des forces cohésives pour la direction tangentielle lors d'un contact. Ainsi, le modèle de Thornton fut employé pour la contribution élastique (éq. 2.67 et 2.69), puisqu'il semble être celui qui est le plus utilisé lors des simulations DEM avec présence de cohésion. En ce qui concerne la portion d'amortissement, le même modèle que pour les simulations sans cohésion fut utilisé (éq. 2.19).

3.2 Implantation du modèle de cohésion dans le code DEM

Les modèles présentés dans les sections 3.1.1 et 3.2.2 furent implantés dans le code DEM de l'URPEI. Les modifications ont été apportées pour permettre d'inclure les forces cohésives pour des interactions mur-particule et encore particule-particule. Les différences majeures sont les suivantes :

- Contrairement aux simulations sans cohésion, il faut absolument définir une valeur de l'énergie de surface dans le fichier de paramètres (USER3D.f90) ;
- Il n'est plus possible de déterminer directement la valeur du rayon de contact a lors d'une collision. En effet, selon le modèle JKR, l'équation reliant le chevauchement et le rayon de contact est maintenant $h = \frac{a^2}{R^*} - \sqrt{\frac{2\pi W a}{E^*}}$ (voir section 2.3.2.2 et éq. 2.45). Pour résoudre l'équation et déterminer la valeur de a , la méthode de Newton est utilisée (éq. 2.46) ;
- À chaque itération en temps, un historique des contacts pour chaque particule est créé pour conserver tous les contacts de l'itération précédente en mémoire. Ceci est essentiel, car suite à une collision entre des particules et lorsque celles-ci commencent à s'éloigner

les unes des autres, une force cohésive est toujours présente, même si les particules ne sont plus physiquement en contact et ce, jusqu'à ce que la force de retrait soit dépassée ;

- Le pas de temps choisi est de $1 \cdot 10^{-6}s$, soit le même que lors des travaux de Bouffard *et al.* (2012b) ;
- Tous les calculs ont été effectués en parallèle en utilisant l'outil MPI (*Message Passing Interface*) sur la grappe de calcul Mammouth-Série II de l'Université de Sherbrooke (Calcul Canada).

3.3 Vérification du code DEM cohésif

Puisque le code DEM original a été modifié, il est essentiel de procéder à des tests de vérification afin de s'assurer qu'il n'y a pas d'erreurs dans la programmation et que les forces sont calculées adéquatement pour les collisions particule-particule et particule-mur. Pour ce faire, une série de tests proposés par Asmar *et al.* (2002) sont effectués. Ceux-ci sont divisés en trois étapes. Premièrement, les quatre premiers tests sont effectués avec une seule particule. Ensuite, les tests 4 à 8 sont une reproduction des tests 1 à 4, mais avec cinq particules. Finalement, deux particules sont considérées pour les tests 9 à 11. Tous les calculs ont été effectués. Le tableau 3.3 présente les propriétés des particules utilisées dans les tests.

	Propriété	Valeur
Particules	Rayon	1 mm
	Masse volumique (ρ)	1500 kg/m ³
	Module d'Young (E)	200 MPa
	Coefficient de Poisson (ν)	0,30
	Facteur d'amortissement normal (c_N)	0,30
	Facteur d'amortissement tangential (c_T)	0,30
	Coefficient de friction (μ)	0,10
	Coefficient de friction statique μ_s	0,15
	Travail d'adhésion (W) pour les tests 1 à 9	0 J/m ²
	Travail d'adhésion (W) pour le test 10	7 J/m ²
	Travail d'adhésion (W) pour le test 11	50 J/m ²
Paroi	Facteur d'amortissement normal (c_N)	0,30
	Facteur d'amortissement tangential (c_T)	0,30
	Coefficient de friction avec le mur (μ_w)	0,20
	Coefficient de friction statique avec le mur $\mu_{s,w}$	0,30
	Coefficient de friction de roulement (μ_r)	0,00025
	Travail d'adhésion (W)	$1 \cdot 10^{-9}$ J/m ²

Tableau 3.3: Propriétés des particules utilisées pour les tests de vérification

Les propriétés des particules sont identiques à celles utilisées par Bouffard, *et al.* (2012b). Par ailleurs, les valeurs de travail d'adhésion pour les tests 10 et 11 ont été sélectionnées après plusieurs essais. Ces valeurs sont choisies pour permettre la réussite des tests 10 et 11 (voir la description des tests). La description des tests est la suivante :

Test 1 : Le premier test consiste en la chute d'une particule à partir d'une hauteur prédéterminée de 10 cm, dont la vitesse de départ est nulle, sur une paroi horizontale située en dessous et en conservant seulement la force normale élastique et la force de gravité. Toutes les autres forces incluant celle de cohésion sont mises à zéro. Le test sera un succès si la particule remonte exactement à la même hauteur, retombe et poursuit ce cycle indéfiniment. Ce test est effectué avec le code informatique original, ainsi qu'avec le code informatique modifié.

Test 2 : Le second test est identique au premier à la différence que la force de gravité est mise à zéro et la hauteur de la particule au départ est fixée à 15 cm. Une vitesse initiale de 0,1 m/s est donnée à la particule pour que celle-ci se déplace horizontalement. Cette dernière entre en collision avec une paroi latérale et change de direction pour se diriger vers une autre paroi horizontale de l'autre côté. Le test sera un succès si la particule se dirige de part et d'autre, sans composantes de vitesse dans les deux autres directions, en frappant les parois, de manière infinie. Ce test est effectué avec le code informatique original ainsi qu'avec le code informatique modifié.

Test 3 : Le troisième test est une reproduction du premier test, mais en ajoutant la force normale d'amortissement. Puisqu'il y a maintenant une dissipation d'énergie au contact de la paroi, le test sera un succès si la particule rebondit une ou plusieurs fois, en diminuant de hauteur à chaque fois (puisque la hauteur du rebond dépend de l'énergie de restitution), jusqu'à ce qu'elle s'immobilise sur la paroi. Ce test est effectué avec le code informatique original ainsi qu'avec le code informatique modifié.

Test 4 : Le quatrième test est similaire au test 2, mais en ajoutant la force normale d'amortissement. De la même manière que dans le test 3, il y a maintenant une dissipation d'énergie au contact des parois latérales. Le test sera un succès si la particule entre en collision une ou plusieurs fois, en ralentissant à chaque fois, jusqu'à tant qu'elle s'immobilise. Ce test est effectué avec le code informatique original ainsi qu'avec le code informatique modifié.

Test 5 : Le test 5 est une reproduction du test 1, mais avec 5 particules parfaitement alignées verticalement, une par-dessus les autres, séparées initialement par la même distance, soit 1 cm. Les particules sont positionnées respectivement à une hauteur de 5 cm, 6 cm, 7 cm, 8 cm et 9 cm. Le succès de ce test sera confirmé par le rebondissement vertical des particules les unes sur les autres à l'infini et sans perte d'énergie.

Test 6 : Le test 6 est une reproduction du test 2, mais avec 5 particules parfaitement alignées horizontalement, séparées initialement par la même distance, soit 1cm. Les particules sont positionnées respectivement à 11 cm, 12 cm, 13 cm, 14 cm et 15 cm selon l'axe des abscisses. Le succès de ce test sera confirmé par le déplacement horizontal des particules et les collisions particule-particule et particule-mur à l'infini sans perte d'énergie.

Test 7 : Le septième test est une reproduction du test 5, mais avec la présence de la force d'amortissement. Ainsi, le succès de ce test sera confirmé par une dissipation d'énergie lors des collisions qui fera en sorte que les 5 particules se stabiliseront les unes sur les autres après quelques itérations en temps.

Test 8 : Ce test est une reproduction du test 6, mais avec la présence de la force d'amortissement. Le succès de ce test sera confirmé par une dissipation d'énergie lors des collisions qui fera en sorte que les 5 particules se stabiliseront les unes à côté des autres après quelques itérations en temps.

Test 9 : Le neuvième test consiste à faire entrer en collision deux particules, situées au départ à une hauteur de 5 cm, chacune d'elle possédant une vitesse initiale de 0,1 m/s. Les forces cohésives et d'amortissement sont nulles. La distance entre les particules est de 5 cm. Le succès de ce test sera confirmé par une restitution complète de l'énergie de lors de l'impact, ce qui se traduira par une vitesse constante avant et après la collision, pour chaque particule.

Test 10 : Ce test est une reproduction du test 9, mais avec une force de cohésion faible qui contribuera à une perte d'énergie lors du contact. La force d'amortissement est nulle pour ne considérer que l'aspect cohésif. Le succès de ce test sera confirmé par une perte d'énergie lors de l'impact, ce qui se traduira par une vitesse post impact inférieure à celle qui précède la collision, pour chacune des particules. Ce test permet seulement une évaluation qualitative.

Test 11 : Le dernier test, similaire aux tests 9 et 10, sert à démontrer la contribution d'une force cohésive élevée lors de la collision. Pour ce faire, deux particules doivent entrer en collision avec une énergie de surface très élevée de sorte que les deux particules doivent rester « collées » suite à l'impact. La force d'amortissement est considérée nulle pour ne tenir compte que de la contribution de la force cohésive. Le succès de ce test sera confirmé si les deux particules restent « collées » et si leur vitesse respective est nulle suite à la cohésion. Ce test permet seulement une évaluation qualitative.

Chaque test a été effectué à l'aide d'un seul processeur, pour une durée d'environ deux heures sur la grappe de calcul *Mammoth-Série II* de l'Université de Sherbrooke.

3.4 Méthodes pour l'évaluation de la précision

Suite aux tests de vérification, la méthodologie pour les tests d'évaluation de la précision est présentée dans cette section. Plus précisément, il est question de la méthode pour calculer l'angle de repos statique pour des écoulements de particules cohésives, ainsi que la méthode pour déterminer la dilatation de volume d'un lit de particules cohésives dans un sphéroniseur.

3.4.1 Propriété des particules pour les tests d'évaluation de la précision

Les propriétés des particules, pour l'étape d'évaluation de la précision, sont présentées au tableau 3.4.

	Propriété	Valeur
Particules	Rayon	1,2 mm
	Masse volumique (ρ)	1500 kg/m ³
	Module d'Young (E)	200 MPa
	Coefficient de Poisson (ν)	0,30
	Facteur d'amortissement normal (c_N)	0,30
	Facteur d'amortissement tangentiel (c_T)	0,30
	Coefficient de friction (μ)	0,10
	Coefficient de friction statique μ_s	0,15
	Travail d'adhésion (W)	0 à 65 J/m ²
Paroi	Facteur d'amortissement normal (c_N)	0,30
	Facteur d'amortissement tangentiel (c_T)	0,30
	Coefficient de friction avec le mur (μ_w)	0,20
	Coefficient de friction statique avec le mur $\mu_{s,w}$	0,30
	Coefficient de friction de roulement (μ_r)	0,00025
	Travail d'adhésion (W)	0,008 J/m ²

Tableau 3.4: Propriétés des particules utilisées pour les tests d'évaluation de la précision

De la même manière que dans la section 3.3, les propriétés des particules sont identiques à celles utilisées par Bouffard, *et al.* (2012b). De plus, la valeur maximale du travail d'adhésion entre les particules est de 65 J/m², car au-delà de cette valeur, la force cohésive est telle qu'elle surpasse toutes les autres forces et il n'y a plus aucun écoulement. En outre, une faible valeur de travail d'adhésion a été considérée pour les contacts particule-paroi, sans quoi les simulations ne fonctionnaient pas (voir section 4.2.1).

3.4.2 Angle de repos

La géométrie permettant d'effectuer des simulations d'angles de repos est d'abord présentée, ainsi que la méthode spécifique pour accomplir ces simulations.

3.4.2.1 Géométrie

Afin d'effectuer les tests d'angle de repos, trois géométries cubiques ont été conçues avec le logiciel de dessin IDEAS. Il a été décidé d'utiliser des cubes, car il s'agit d'une géométrie simple à concevoir, permettant facilement une simulation en trois dimensions. De plus, des géométries similaires ont déjà été utilisées dans la littérature (Anand, *et al.*, 2009). Les deux premiers cubes possèdent des arêtes d'une longueur de 20 cm. Ceux-ci sont identiques à la différence que pour un des deux, la surface du bas possède une fente de 5 cm de largeur par 20 cm de longueur. Le troisième cube possède des arêtes de 30 cm.

3.4.2.2 Méthode

Dans un premier temps, le cube de 20 cm qui ne possède pas de fente est rempli de 295 837 particules. Celles-ci sont d'abord générées légèrement au-dessus du cube et tombent ensuite en chute libre dans celui-ci. Ensuite, ce cube est remplacé par celui de 20 cm d'arête qui possède une fente sur la surface inférieure, afin de laisser les particules s'écouler. Il est à noter que le troisième cube se situe en dessous, permettant ainsi de recueillir les particules. La figure 3-2 montre la disposition des cubes.

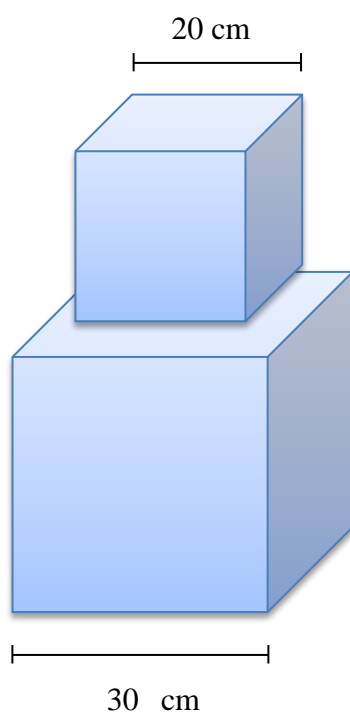


Figure 3-2: Disposition des cubes pour les tests d'angle de repos

La surface inférieure du cube possédant la fente est illustrée à la figure 3-3.

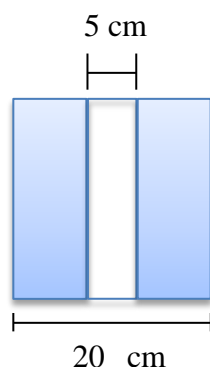


Figure 3-3: Surface inférieure du cube de 20 cm possédant une fente de 5 cm

L'étape du remplissage du cube est illustrée à la figure 3-4.

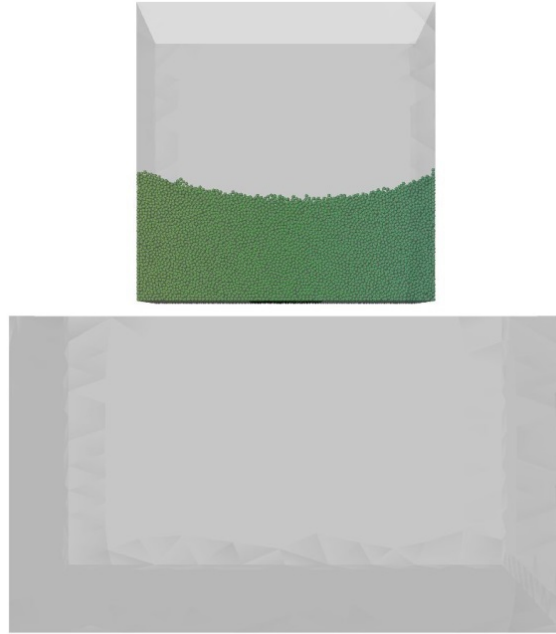


Figure 3-4: Remplissage du cube supérieur

Un total de 33 simulations ont été effectuées sur la grappe de calculs *Mammoth-Série II* de l'Université de Sherbrooke, à raison de 360 heures de temps de calcul au moyen de 24 processeurs, ce qui représente un peu plus de 11 secondes de temps réel sauf pour celle dont la force cohésive est absente, qui correspond à un temps de 18 secondes. Le temps est plus long lorsque les forces cohésives sont absentes puisque la contribution de la force gravitationnelle est plus importante. La première simulation, soit celle où la force cohésive entre les particules est nulle, est effectuée avec le code DEM original. De plus, pour les 32 autres simulations, des valeurs de travail d'adhésion particule-particule ont été utilisées, afin de correspondre à un nombre de Bond précis :

$$Bo = \frac{F_{coh}}{mg} = \frac{\text{Force de retrait}}{mg} = \frac{\frac{3}{2}\pi WR^*}{mg} \quad (3.4)$$

Les différentes valeurs sont présentées au tableau 3.5.

Bo	w (J/m²)
0	0
0,1	0,002616
0,2	0,005232
0,3	0,007848
0,4	0,010464
0,5	0,013080
0,6	0,015696
0,7	0,018312
0,8	0,020928
0,9	0,023544
1	0,026160
2	0,052320
3	0,078480
4	0,104640
5	0,130800
6	0,156960
7,5	0,196200
8	0,209280
9	0,235440
10	0,261600
12,5	0,327000
15	0,392400
17,5	0,457800
20	0,523200
25	0,654000
30	0,784800
35	0,915600
38,5	1,007160
45	1,177200
50	1,308000
55	1,438800
60	1,569600
65	1,700400

Tableau 3.5: Valeurs des Bo et de travail d'adhésion pour les simulations d'angles de repos

3.4.2.3 Reproductibilité

Des tests de reproductibilité pour la vidange du cube et pour l'angle de repos ont été effectués pour certains cas de figure, avec la méthode présentée dans la section 3.4.2.2. Les valeurs du travail d'adhésion et les nombres de Bond de ces tests sont les suivants :

Bo	W (J/m ²)
0	0
5	0,130800
15	0,392400
20	0,523200
65	1,700400

Tableau 3.6: Valeurs des Bo et de travail d'adhésion pour les tests de reproductibilité

3.4.3 Dilatation de volume

La géométrie permettant d'effectuer des simulations de dilatation de volume est d'abord présentée, ainsi que la méthode spécifique pour accomplir ces simulations dans un sphéroniseur. Un sphéroniseur consiste en un équipement cylindrique dont la paroi du dessous est en rotation.

3.4.3.1 Géométrie

De la même manière qu'avec le cube présenté ci-haut, le sphéroniseur a été conçu avec le logiciel de dessin IDEAS. Celui-ci est constitué d'un cylindre et d'une plaque circulaire qui constitue le fond du sphéroniseur et à laquelle il est possible d'imposer une vitesse de rotation. Les dimensions du sphéroniseur utilisé sont présentées à la figure 3-5.

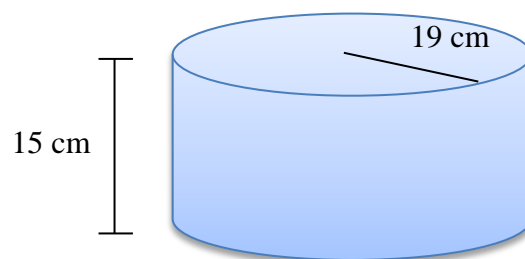


Figure 3-5: Dimensions du sphéroniseur

3.4.3.2 Méthode

Un total de 295 840 particules sont ajoutées dans le sphéroniseur illustré à la figure 3-5. Celles-ci sont d'abord générées légèrement au-dessus de l'équipement et tombent en chute libre dans celui-ci. La vitesse de la plaque est fixée à 24,086 rad/s (230 RPM). Un total de 36 simulations ont été lancées sur la grappe de calculs *Mammouth-Série II* en posant différentes valeurs de travail d'adhésion. Dans le cas du sphéroniseur, aucune référence au nombre de Bond n'a été effectuée, puisque celui-ci varie en fonction de la position à l'intérieur de l'appareil puisque le taux de cisaillement n'est pas identique en tout point dans le lit de particules. Il faut donc considérer un facteur correctif lors du calcul du nombre de Bond (Bouffard, *et al.*, 2012b) :

$$Bo = \frac{F_{coh}}{\sqrt{(mg)^2 + (2mR^*\dot{\gamma}^2)^2}} \quad (3.5)$$

où $\dot{\gamma}$ est le taux de cisaillement.

Le temps de calcul pour chaque simulation a été fixé à 120 heures pour 24 processeurs, ce qui correspond à un temps de simulation réel d'environ 3,5 secondes. Comme dans la section 3.4.2, le cas où la force cohésive est nulle a été simulé avec le code DEM original. Les différentes valeurs de travail d'adhésion utilisées sont présentées au tableau 3.7.

W (J/m²)	W (J/m²)
0	4,5
0,25	4,75
0,5	5
0,75	6
1	7
1,25	8
1,5	9
1,75	10
2	11
2,25	12
2,5	13
2,75	14
3	15
3,25	16
3,5	17
3,75	18
4	19
4,25	20

Tableau 3.7: Valeurs de travail d'adhésion pour les tests d'écoulement dans le sphéroniseur

Enfin, pour chaque simulation, le volume du lit de particules de forme toroïdale est calculé et est comparé avec le volume du lit obtenu lorsque les forces cohésives sont nulles. Le volume est calculé selon le théorème de Pappus-Guldin (Lanni, Saramago, & Ceccarelli, 2002) qui permet de calculer le volume selon un tore dont la surface transversale est circulaire :

$$V = 2\pi \cdot \pi r^2 \cdot R \quad (3.6)$$

où r est le rayon d'une section transversale du tore et R est la distance entre le milieu du tore jusqu'au milieu de la section transversale. Pour un tore dont la surface est elliptique, ce qui est le cas dans la présente étude, l'équation 3.6 devient :

$$V = 2\pi \cdot \pi r_1 r_2 \cdot R \quad (3.7)$$

En remplaçant r_1 par a , r_2 par b et R par c et en simplifiant, l'équation 3.7 devient :

$$V = 2\pi^2 abc \quad (3.8)$$

Enfin, tel qu'illustré à la figure 3-6, la véritable forme obtenue lors d'un écoulement dans le sphéroniseur correspond à un quart de tore elliptique.

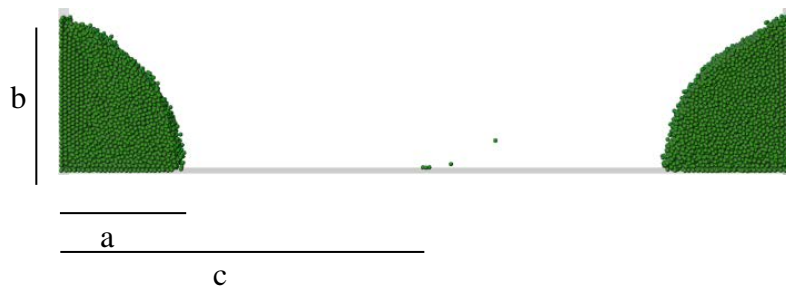


Figure 3-6: Calcul du volume de la forme toroïdale

L'équation 3.7 devient donc :

$$V = \frac{2\pi^2 abc}{4} \quad (3.9)$$

3.4.3.3 Tests supplémentaires

Puisque les simulations dans le sphéroniseur ne représentent qu'environ 3,5 secondes de temps réel, une d'entre elles a été relancée quatre fois sur la grappe de calcul pour pouvoir déterminer si le volume calculé était constant. Cette simulation est celle où la valeur du travail d'adhésion était de $0,5 \text{ J/m}^2$. Les valeurs du travail d'adhésion des simulations supplémentaires effectuées sont présentées au tableau 3.8, ainsi que le temps de calcul utilisé et le temps réel pour chacune d'elle.

W (J/m²)	Nombre d'heures de temps de calcul au moyen de 24 processeurs	Temps réel (s)
0,25	120	3
0,5	480	15
4,5	120	3
8	120	3
12	120	3

Tableau 3.8: Simulations supplémentaires dans le sphéroniseur

CHAPITRE 4 RÉSULTATS ET DISCUSSION

Au chapitre 3, la méthodologie concernant les tests de vérification et d'évaluation de la précision a été présentée. Le chapitre 4 concerne maintenant les résultats et l'analyse de ces tests. La première section concerne l'étape de vérification, afin de s'assurer que le code informatique fonctionne correctement. Il est important de spécifier qu'il s'agit d'une vérification qualitative seulement. Ensuite, la deuxième section contient les résultats et l'analyse des tests d'évaluation de la précision, plus précisément de l'augmentation de l'angle de repos en fonction de la force cohésive, ainsi que la dilatation du volume du lit de particules à l'intérieur du sphéroniseur.

4.1 Résultats des tests de vérification

Pour le premier test de vérification illustré à la figure 4-1, on peut constater que la particule, qui chute à partir d'une hauteur prédéfinie de 10 cm, rebondit et revient toujours à sa hauteur initiale et ce à l'infini. C'est le cas pour le code original, ainsi que pour le code modifié. Par ailleurs, la vitesse oscille toujours entre environ -1,2 m/s et 1,2 m/s dans le cas des deux codes (figure 4-2). Ceci confirme donc de manière qualitative le test 1.

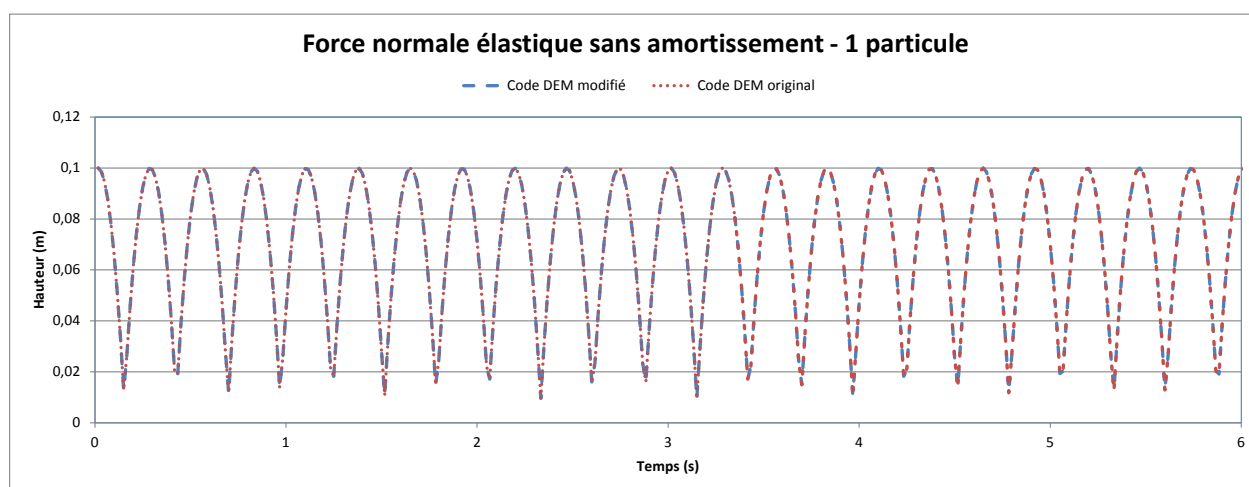


Figure 4-1: Variation de la hauteur pour test 1 de l'étape de vérification

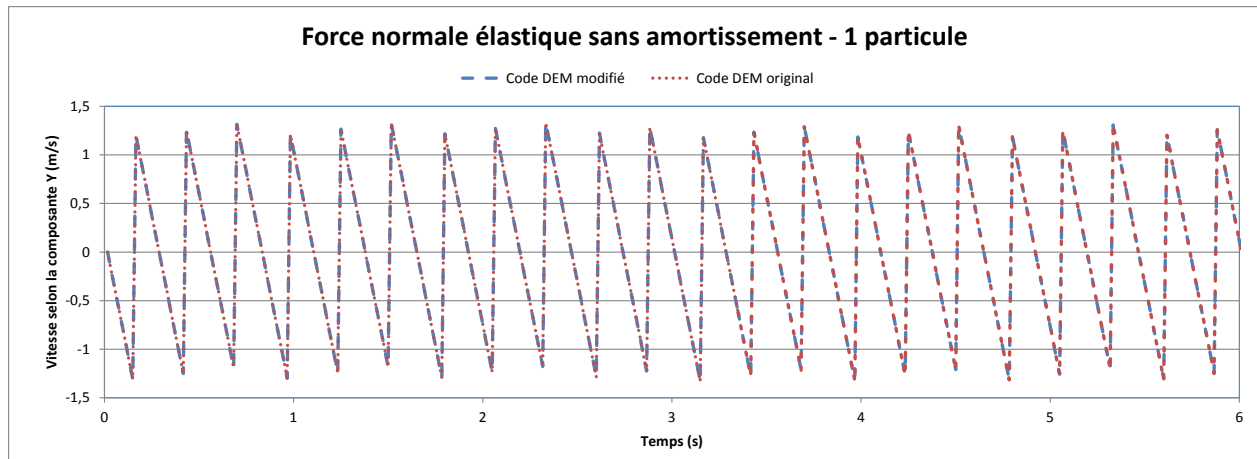


Figure 4-2: Variation de la vitesse pour le test 1 de l'étape de vérification

Il est possible de constater aux graphiques 4-1 et 4-2 qu'il y a des variations à chaque fois que la particule en collision avec la paroi inférieure. Il se pourrait que la cause soit la fréquence d'enregistrement des données dans le fichier de sortie du programme informatique (60 enregistrements par seconde). Le second test de vérification illustré à la figure 4-3 est aussi un succès. En effet, en retirant la gravité et en conservant uniquement la force de contact normale élastique, la particule entre en collision sur chaque paroi de droite à gauche et vice versa. Les résultats sont identiques pour le code original et pour le code modifié.

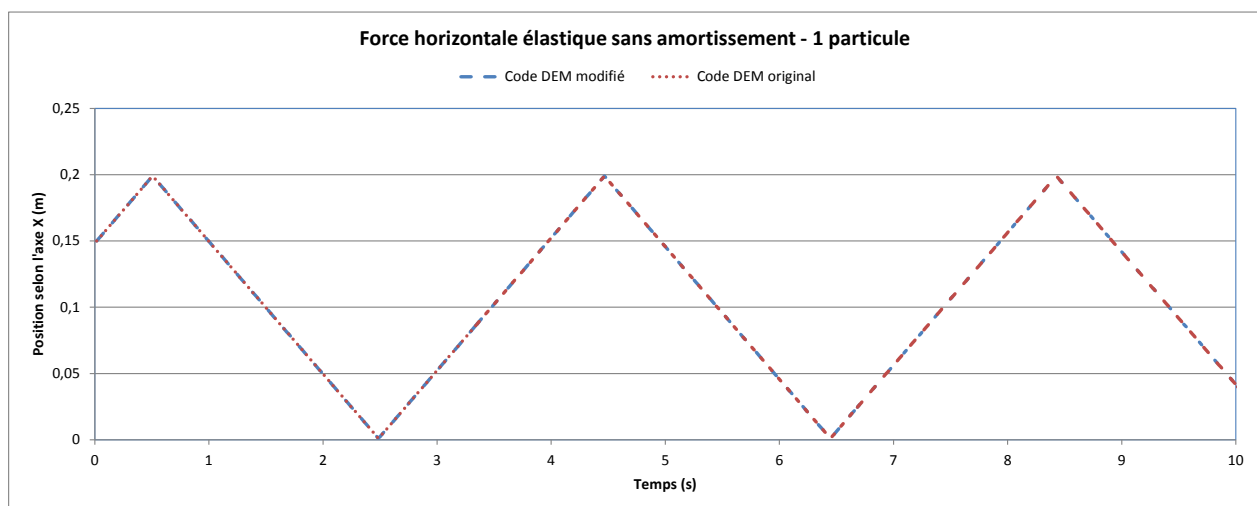


Figure 4-3: Variation de la position en X pour le test 2 de l'étape de vérification

Puisque l'énergie est complètement restituée lors d'un contact, la vitesse de 10 m/s est toujours conservée, ce qui est juste. Ceci est illustré à la figure 4-4.

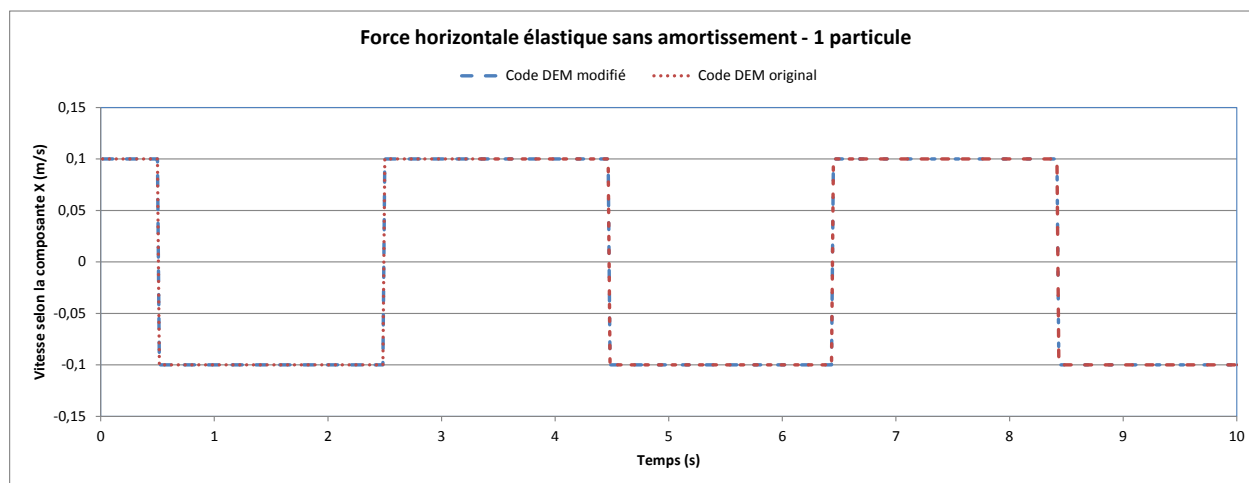


Figure 4-4: Variation de la vitesse pour le test 2 de l'étape de vérification

Le troisième test illustré à la figure 4-5 consistait à reproduire le premier test, mais en ajoutant la force d'amortissement. Encore une fois, les résultats du code original et ceux du code modifié sont identiques. De plus, il est possible de constater que suite à un premier impact, une partie de l'énergie n'est pas restituée et par conséquent la particule cesse rapidement de rebondir sur la paroi inférieure pour ensuite se stabiliser au repos.

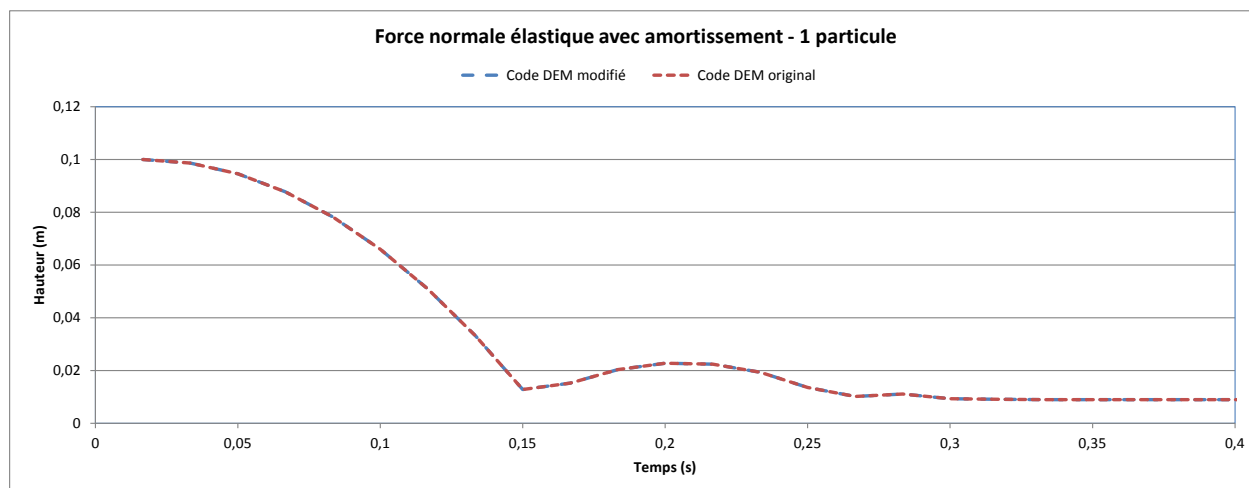


Figure 4-5: Variation de la hauteur pour le test 3 de l'étape de vérification

La figure 4-6 permet de visualiser à chaque fois la diminution de la vitesse et ce, pour chaque rebond de la particule.

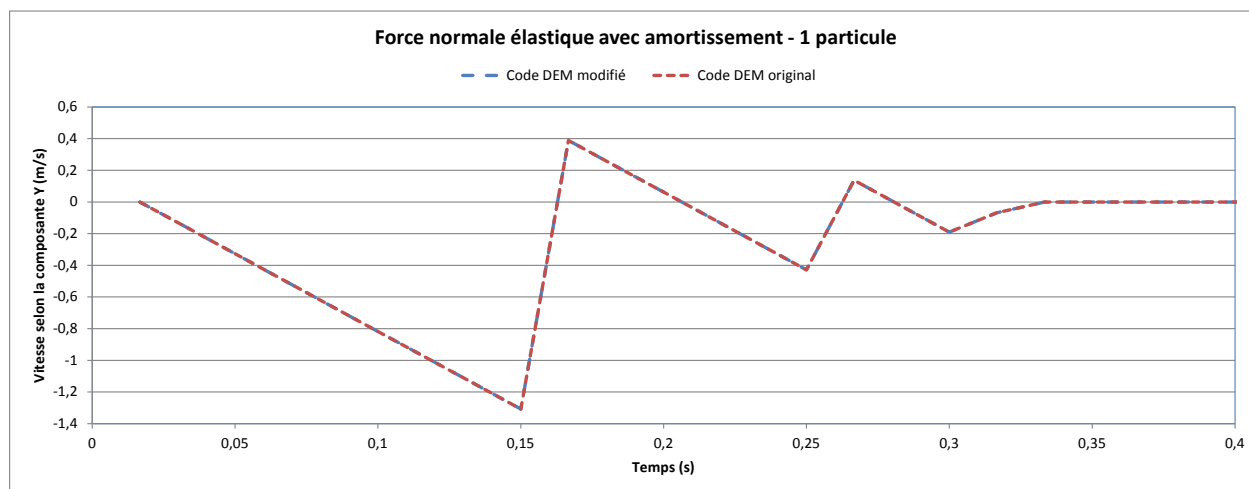


Figure 4-6: Variation de la vitesse pour le test 3 de l'étape de vérification

Le quatrième test illustré à la figure 4-7 est une reproduction du deuxième test, avec l'ajout de la force d'amortissement. La particule entre en collision avec la paroi de droite et on peut constater qu'une portion de l'énergie n'est pas restituée. Ensuite, la particule entre en collision avec la paroi de gauche et il y a encore une perte d'énergie par amortissement. Tel qu'illustré à la figure 4-8, la vitesse diminue suite à une collision. Ce test est donc aussi un succès.

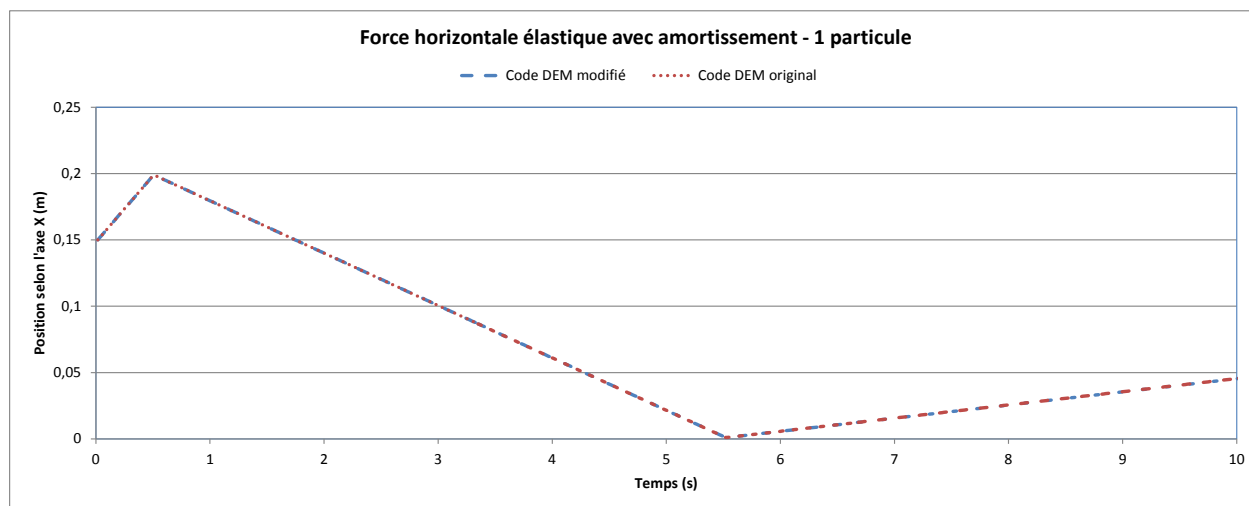


Figure 4-7: Variation de la position en X pour le test 4 de l'étape de vérification

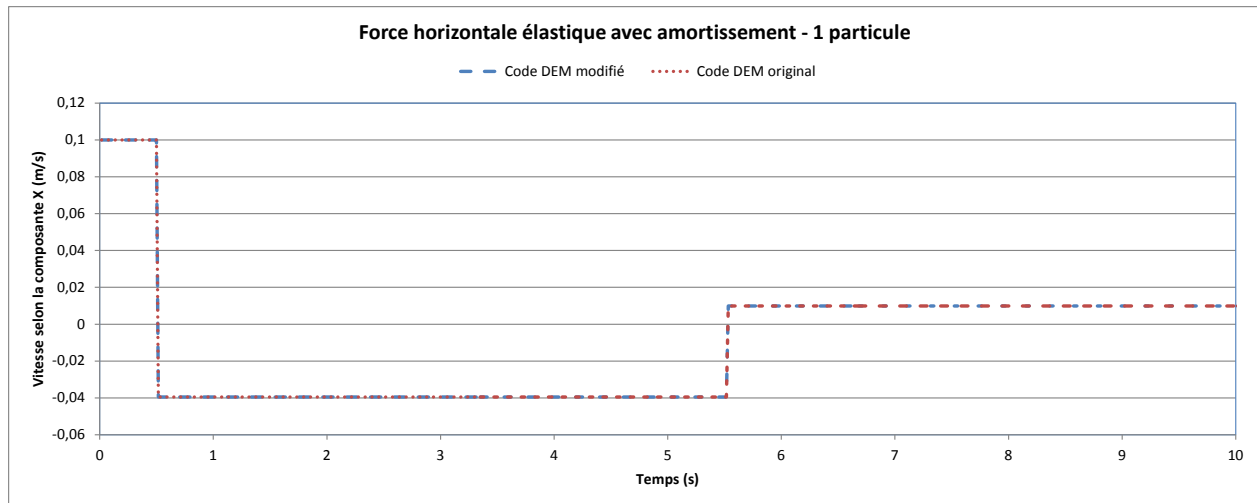


Figure 4-8: Variation de la vitesse pour le test 4 de l'étape de vérification

À partir du cinquième test, 5 particules sont maintenant utilisées. Pour ce test, les 5 particules parfaitement alignées à la verticale tombent en chute libre à partir d'une hauteur prédéfinie. Puisque la seule force de contact conservée pour ce cas est la force normale élastique, les particules rebondissent à l'infini les unes sur les autres. Ceci est un comportement complexe et difficile à illustrer. Tout de même, la figure 4-9 montre les résultats des deux premières secondes de simulation pour le code modifié. Il est possible de voir que les particules sont séparées initialement par la même distance et qu'elles rebondissent les unes sur les autres sans arrêt.

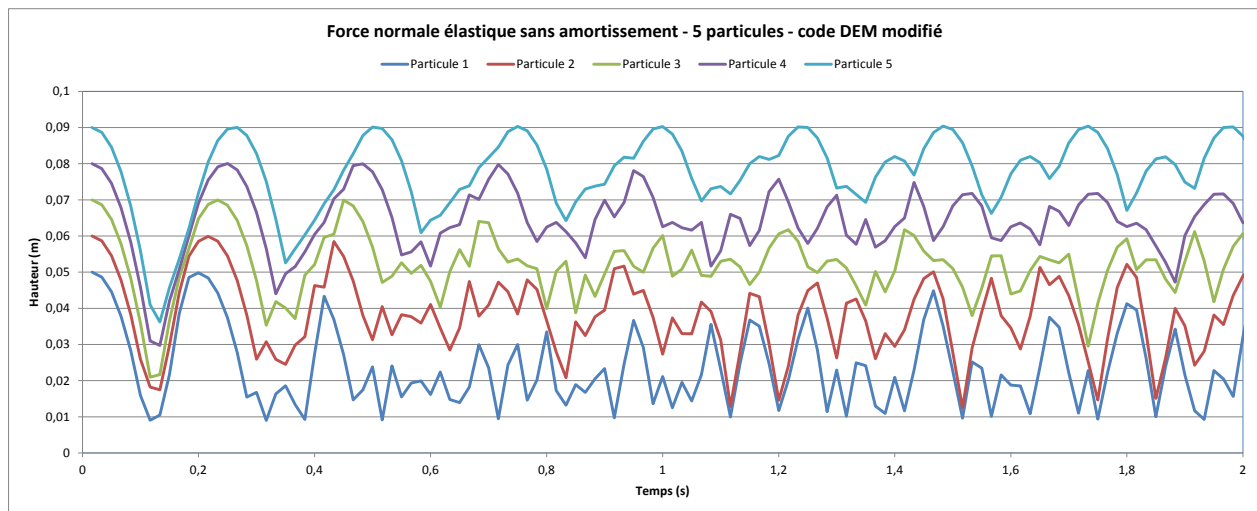


Figure 4-9: Variation de la hauteur pour le code DEM modifié le test 5 de l'étape de vérification

La figure 4-10 illustre les résultats obtenus avec le code original. Ceux-ci sont similaires aux résultats présentés à la figure 4-9.

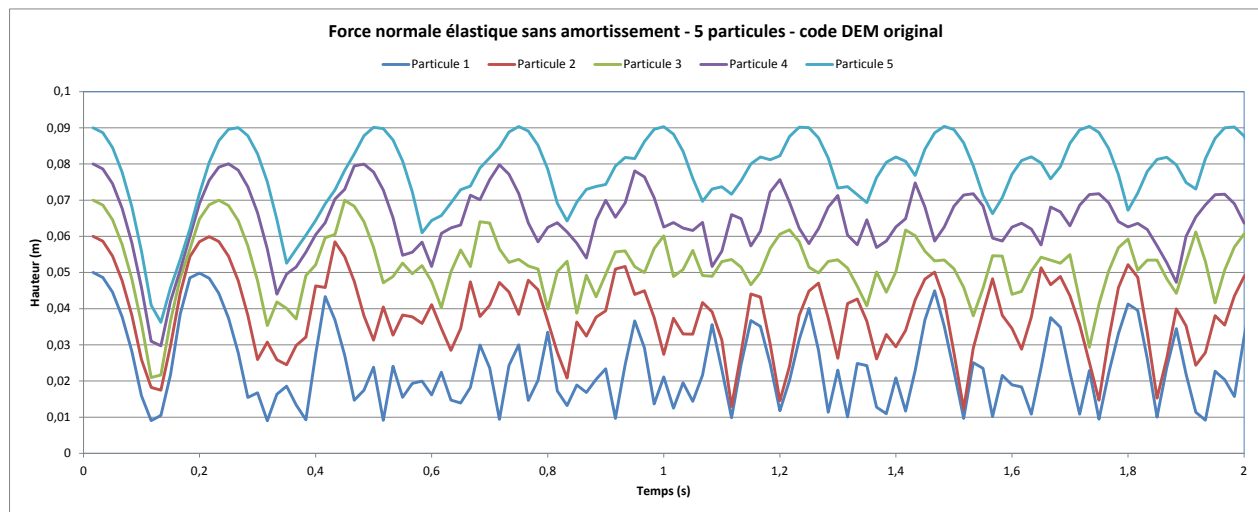


Figure 4-10: Variation de la hauteur pour le code DEM original pour le test 5 de l'étape de vérification

Le sixième test consistait à reproduire le deuxième, mais avec 5 particules. Il est possible de constater que les particules se dirigent à l'horizontale et qu'aucune perte d'énergie par amortissement n'est présente. En effet, celles-ci percutent les parois latérales de la droite vers la gauche et de la gauche vers la droite à l'infini. Ceci est illustré à la figure 4-11. Par ailleurs, les résultats obtenus avec le code DEM original (fig. 4-12) semblent identiques à ceux obtenus avec le code DEM modifié, ce qui confirme le succès de ce test.

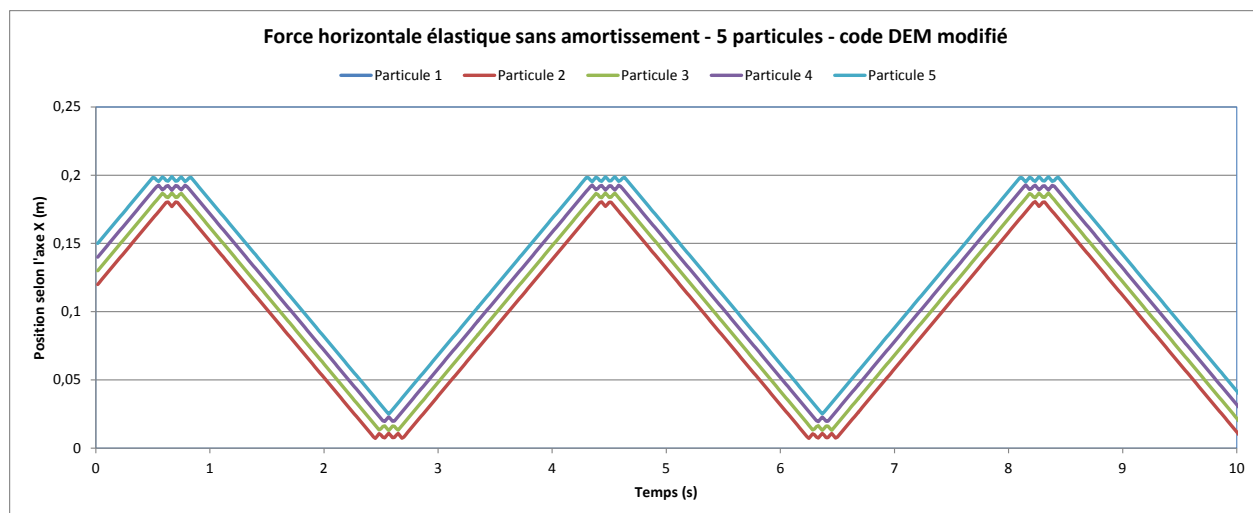


Figure 4-11: Variation de la position en X code DEM modifié pour le test 6 de l'étape de vérification

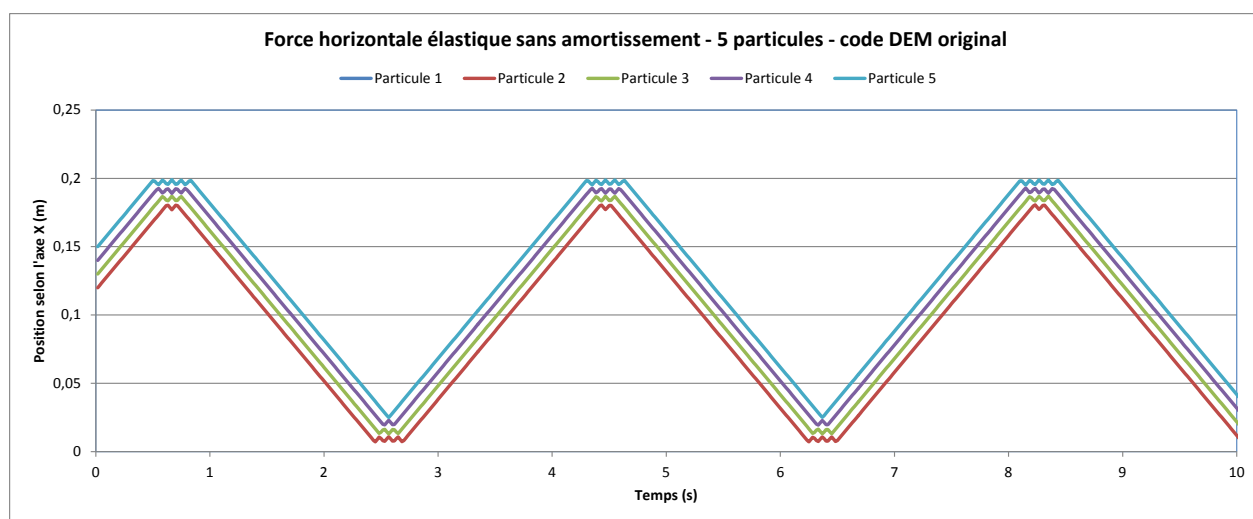


Figure 4-12: Variation de la position en X du code DEM original pour le test 6 de l'étape de vérification

Au septième test illustré à la figure 4-13, une reproduction du test 3 est effectuée, mais en ajoutant la force d'amortissement. On peut constater que lors de l'impact avec une paroi inférieure, il y a bel et bien une perte d'énergie par amortissement et les cinq particules vont se

stabiliser les unes sur les autres sur la paroi. Les résultats obtenus avec le code original (fig 4-14) sont similaires aux résultats obtenus avec le code DEM modifié. Le test est donc un succès.

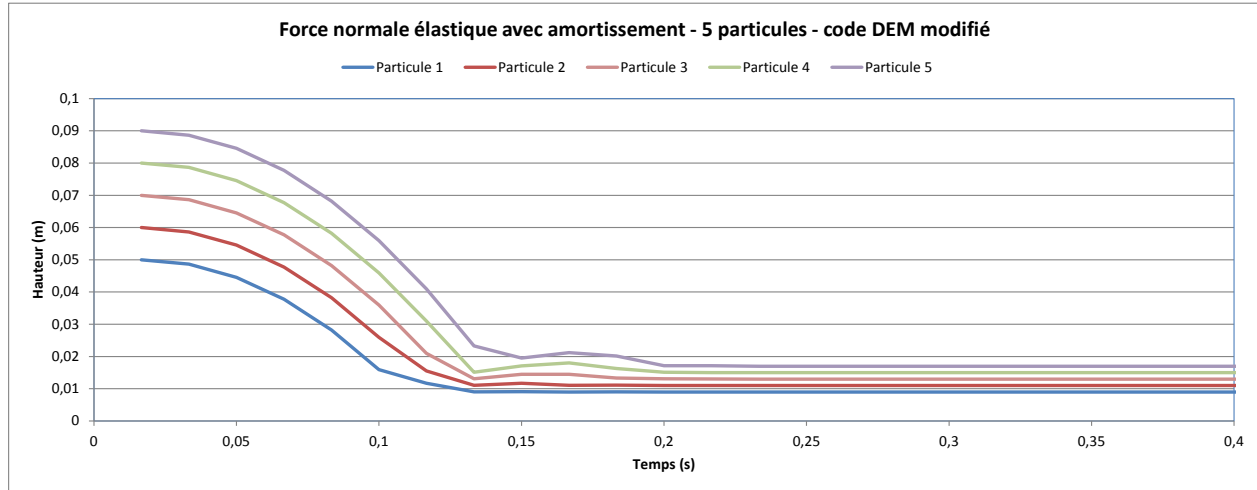


Figure 4-13: Variation de la hauteur du code DEM modifié pour le test 7 de l'étape de vérification

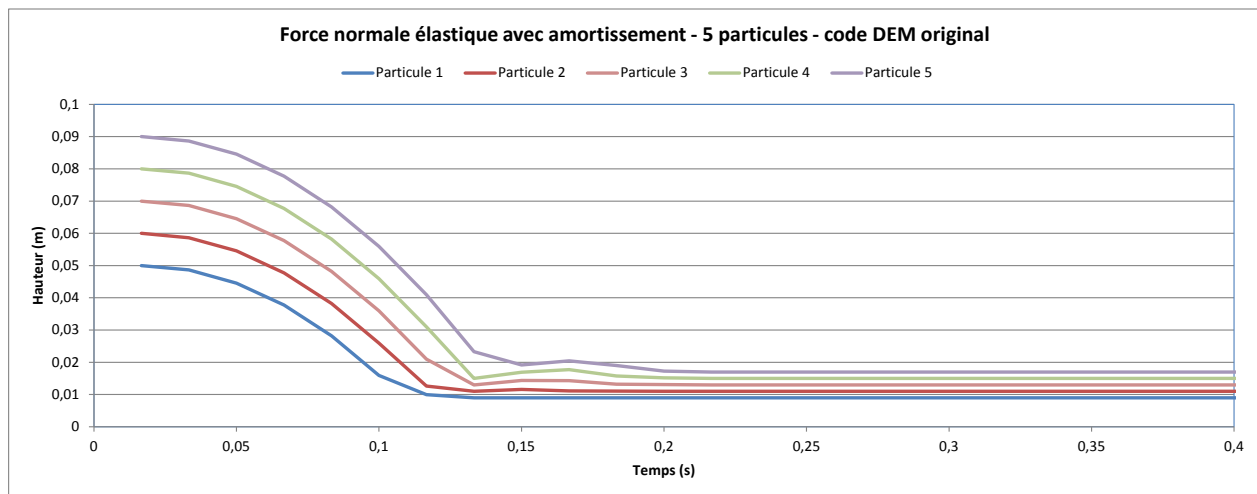


Figure 4-14: Variation de la hauteur du code DEM original pour le test 7 de l'étape de vérification

Le huitième test illustré à la figure 4-15 consistait à reproduire le test 6 en ajoutant la force d'amortissement. Lors du premier impact avec une paroi latérale, on peut constater qu'il y a effectivement une perte d'énergie par amortissement, puisque les cinq particules ne se dirigent

que très lentement vers la paroi latérale située de l'autre côté. Les résultats obtenus avec le code original (fig. 4-16) semblent aussi identiques à ceux obtenus avec le code modifié.

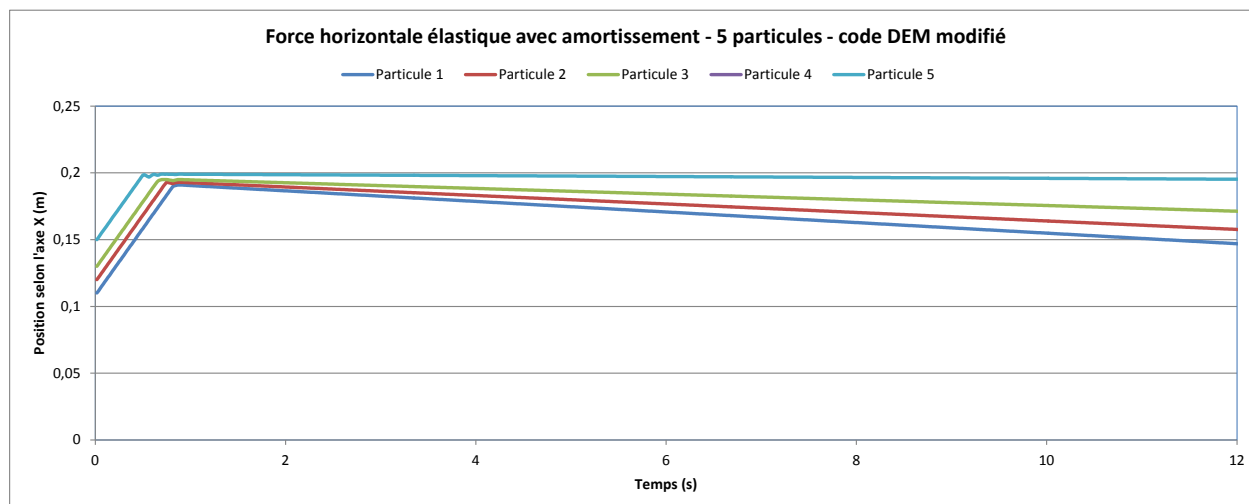


Figure 4-15: Variation de la position en X du code DEM modifié pour le test 8 de l'étape de vérification

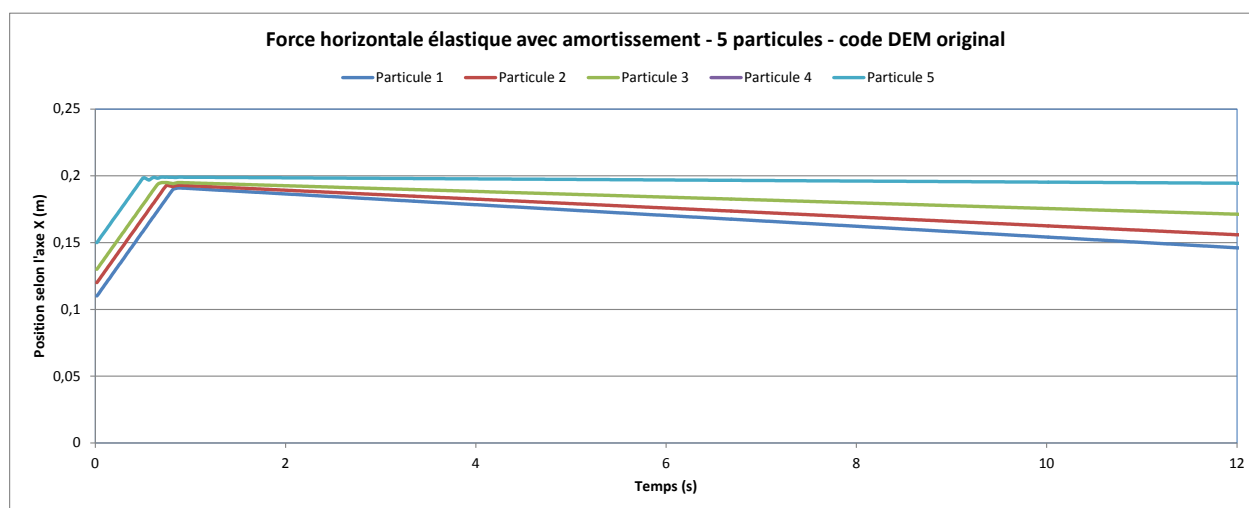


Figure 4-16: Variation de la position en X du code DEM original pour le test 8 de l'étape de vérification

Pour les 3 derniers tests, seulement deux particules sont considérées. Dans un premier temps, le test 9 illustré à la figure 4-17 consistait en l'impact de deux particules avec la force normale élastique comme seule force de contact. Lors de l'impact des particules, l'énergie est complètement restituée et celles-ci s'éloignent avec la même vitesse qu'elles possédaient avant l'impact. Le succès de ce test est donc confirmé.

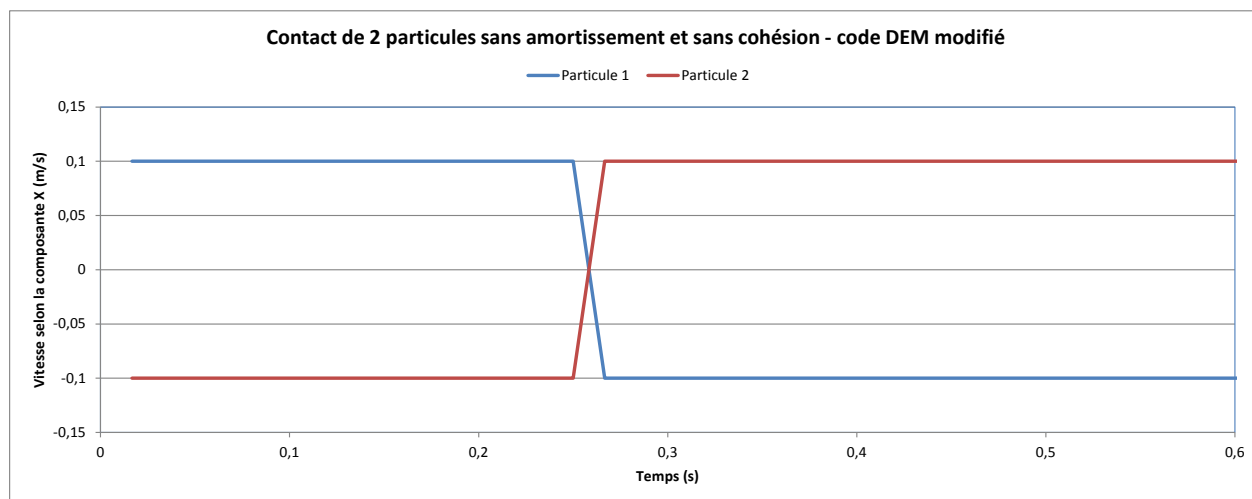


Figure 4-17: Variation de la vitesse pour le test 9 de l'étape de vérification

Le dixième illustré à la figure 4-18 consistait à reproduire le neuvième test, mais en ajoutant une faible force cohésive. Suite à l'impact, une partie de l'énergie n'est pas restituée, puisque la vitesse post-impact est plus faible que celle précédant l'impact, ce qui confirme le succès du dixième test.

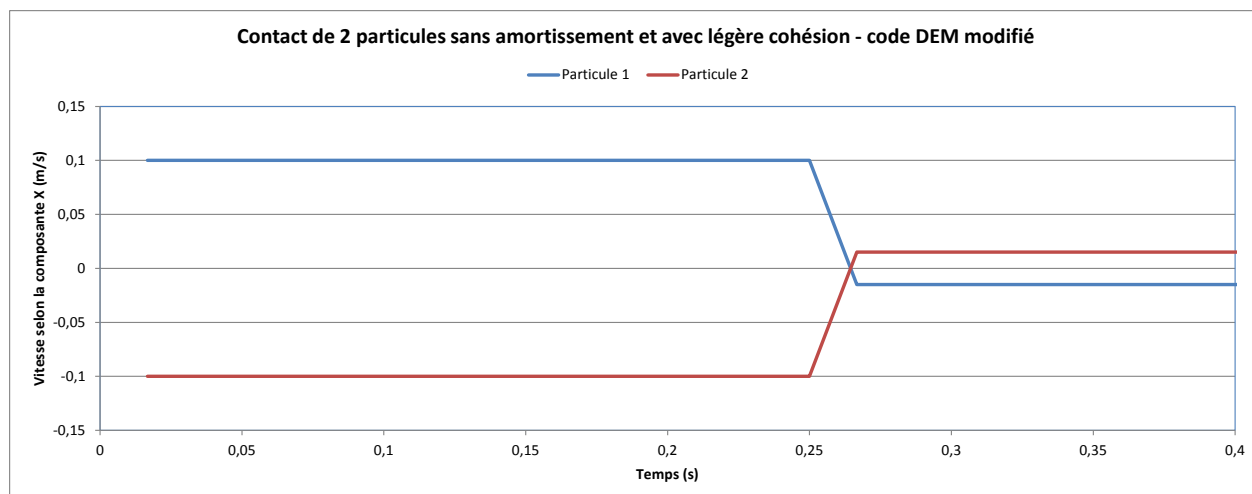


Figure 4-18: Variation de la vitesse pour le test 10 de l'étape de vérification

Enfin, pour le onzième et dernier test illustré à la figure 4-19, le dixième test est reproduit, mais en considérant une force cohésive élevée, de sorte que les particules doivent restées collées l'une sur l'autre. Suite aux résultats obtenus, il s'avère que c'est effectivement le cas, ce qui confirme le succès de ce dernier test.

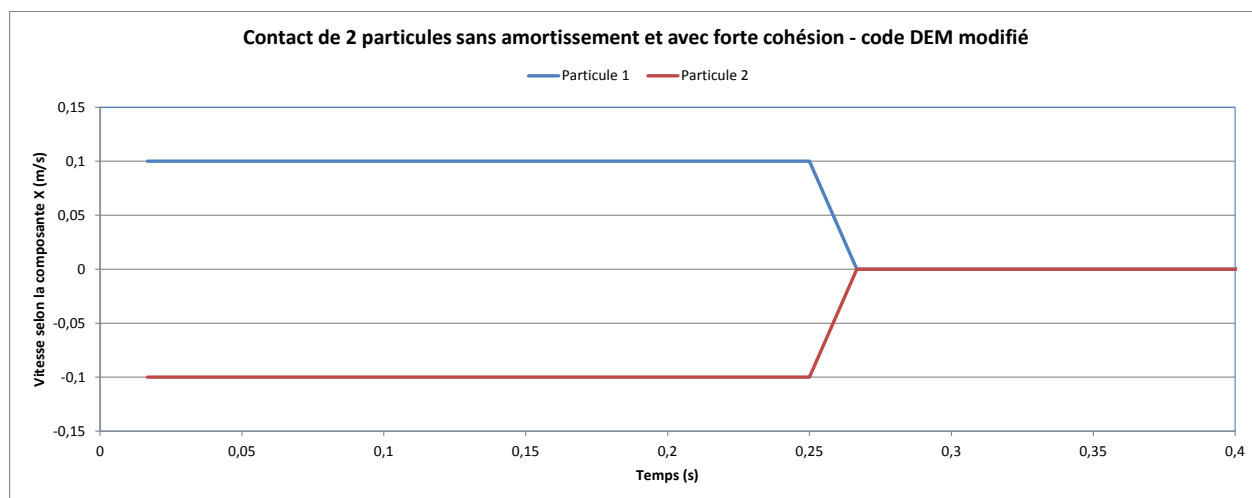


Figure 4-19: Variation de la vitesse pour le test 11 de l'étape de vérification

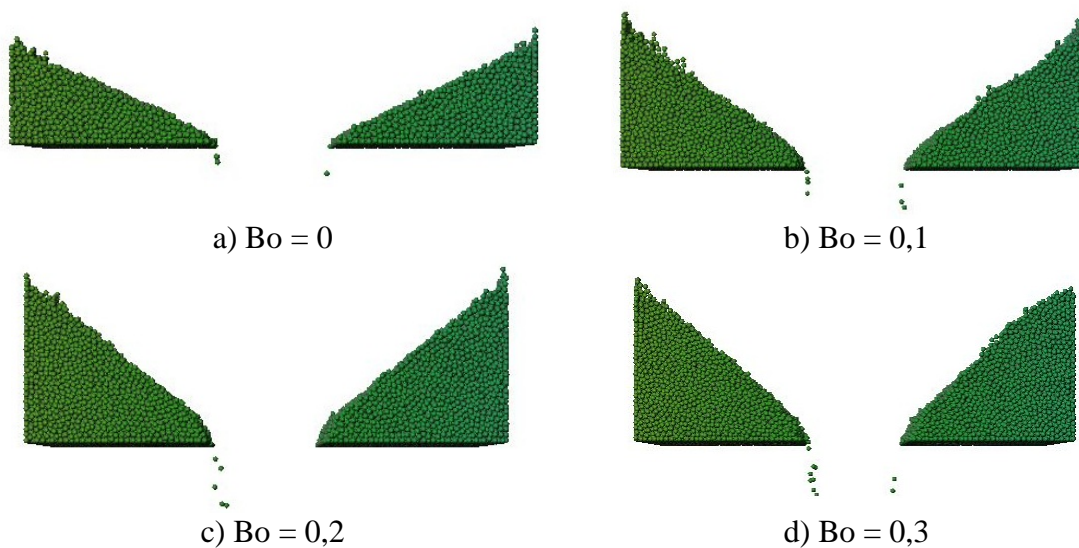
Suite aux onze tests de vérification, il semble que les résultats obtenus avec le code DEM modifié soient cohérents et similaires aux résultats obtenus avec le code DEM original. Par contre, des comparaisons avec des solutions analytiques devraient être effectuées pour plus de rigueur. De plus, selon les trois derniers tests, il semble que l'ajout d'un modèle de force permettant de considérer la force cohésive fonctionne correctement. Il est cependant nécessaire de rappeler que ces tests consistent en une vérification qualitative seulement.

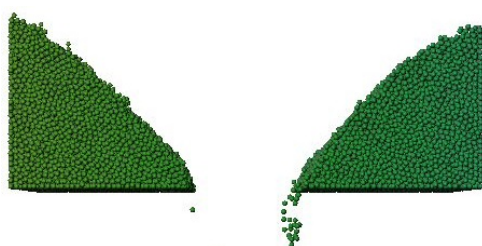
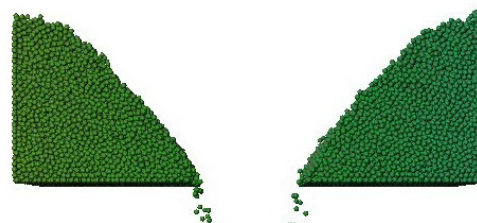
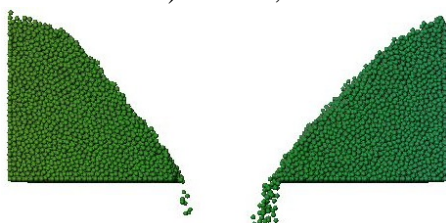
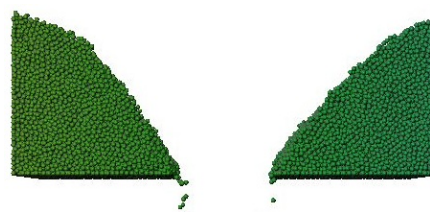
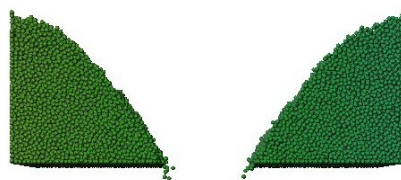
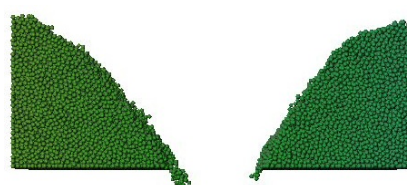
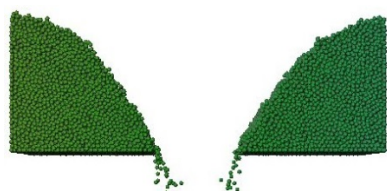
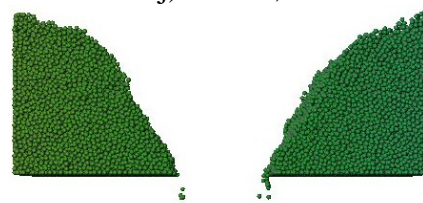
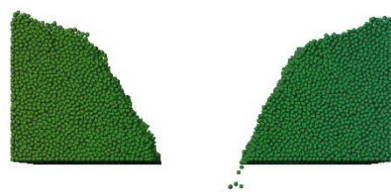
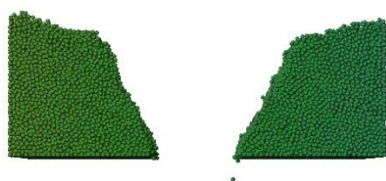
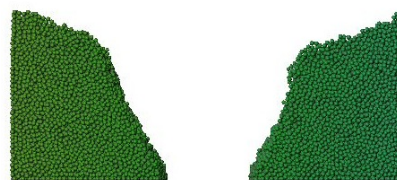
4.2 Résultats de l'évaluation de la précision

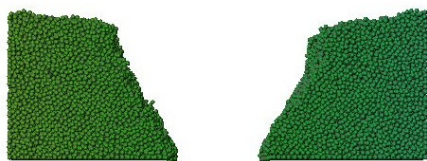
Suite au succès des tests de vérification du code informatique, les simulations d'angle de repos à l'aide de la vidange d'un cube ont été effectuées, ainsi que les tests de dilatation de volume.

4.2.1 Augmentation de l'angle de repos en fonction du nombre de Bond

Les résultats principaux des 33 tests d'angle de repos présentés dans la section 3.4.2 sont illustrés à la figure 4-20. En moyenne, chacune des simulations correspond à un temps moyen réel de 11 secondes, sauf celle avec $Bo = 0$, qui correspond à un temps moyen de 18 secondes puisqu'il s'agit d'un écoulement libre. À la lumière des résultats obtenus, il s'avère que malgré un temps d'écoulement d'environ 11 secondes, certaines particules continuaient tout de même à s'écouler. Cependant, il a été constaté que cela était négligeable et que l'impact sur l'angle de repos était peu élevé.



e) $Bo = 0,4$ f) $Bo = 0,5$ g) $Bo = 0,6$ h) $Bo = 0,7$ i) $Bo = 0,8$ j) $Bo = 0,9$ k) $Bo = 1$ l) $Bo = 2$ m) $Bo = 3$ n) $Bo = 4$ o) $Bo = 5$ p) $Bo = 6$

q) $Bo = 7,5$ r) $Bo = 8$ s) $Bo = 9$ t) $Bo = 10$ u) $Bo = 12,5$ v) $Bo = 15$ w) $Bo = 17,5$ x) $Bo = 20$ y) $Bo = 25$ z) $Bo = 30$ aa) $Bo = 35$ bb) $Bo = 38,5$

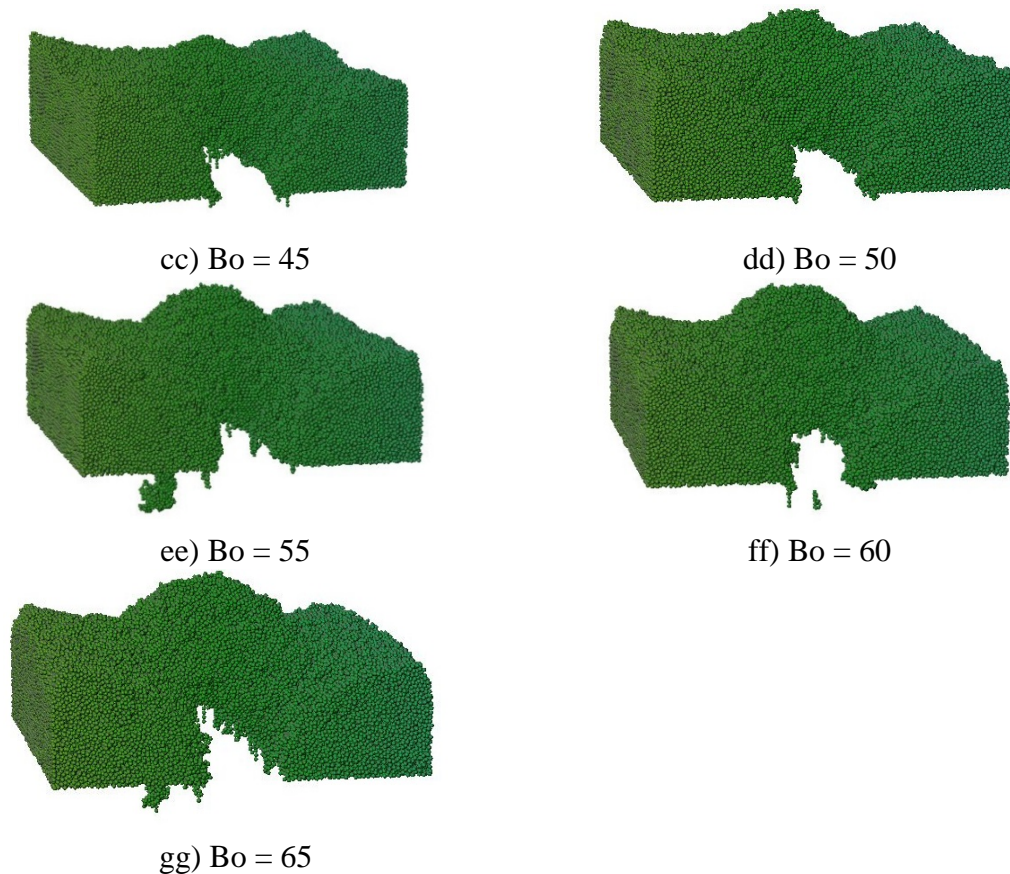


Figure 4-20: Angles de repos obtenus pour la vidange du cube

En ce qui concerne l'écoulement à travers l'orifice de 5 cm de largeur, il s'avère que selon les résultats obtenus, l'écoulement complet est possible jusqu'à ce que la force cohésive entre les particules soit environ 7,5 fois plus élevée que le poids ($Bo = 7,5$). À partir de $Bo = 8$, la force cohésive est telle qu'une portion du lit de particules, qui se trouve au-dessus de la fente, ne s'écoule pas, conformément à ce qui est décrit dans les travaux de Matuttis & Schinner (2001). Par ailleurs, en analysant les données obtenues, il est possible de constater la formation d'une arche au niveau de cette portion de particules. La formation de celle-ci peut s'expliquer par le fait que les particules situées au-dessus du lit de particule vont s'écouler vers la section de la fente qui n'est pas obstruée. Pour les simulations allant de $Bo = 0$ à $Bo = 7,5$, la figure 4-21 illustre bien la relation entre l'angle de repos et le nombre de Bond.

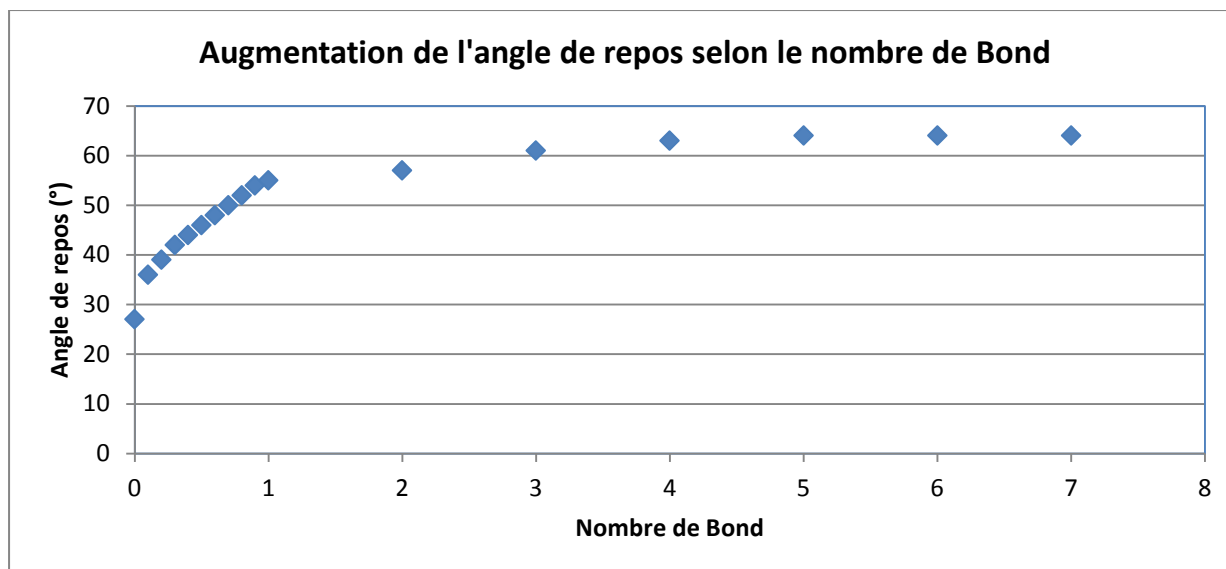


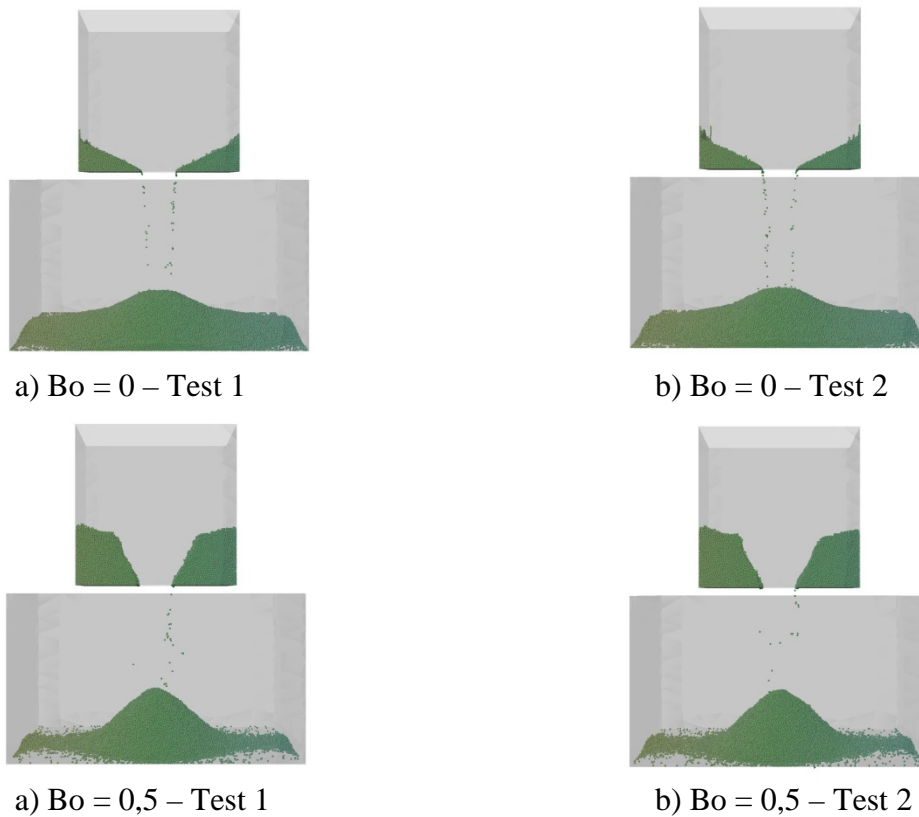
Figure 4-21: Angle de repos en fonction du nombre de Bond

Conformément à l'information recueillie lors de la revue de littérature (Nase, *et al.*, 2001), l'angle de repos semble augmenter de façon linéaire de $Bo = 0$ à $Bo = 1$, soit jusqu'à ce que la force cohésive devient égale au poids particulaire et à partir de $Bo = 1$, l'évolution de l'angle n'est plus la même. En effet, de $Bo = 1$ et jusqu'à $Bo = 7,5$, l'angle semble se stabiliser aux alentours de 64° , ce qui est cohérent, car à partir de ce stade la force cohésive dépasse largement l'effet de la gravité et un écoulement complet n'a pas lieu. En effet, à partir de ce moment, les particules ne s'écoulent pas avec fluidité, il s'agit plutôt de détachements sporadiques d'agglomérats non uniformes de particules. En outre, l'angle final obtenu est étroitement lié à la largeur de la fente de la paroi inférieure du cube (Anand, *et al.*, 2009). Ainsi, il n'est pas possible de comparer directement l'angle obtenu avec les données trouvées dans la littérature. En effet, l'utilisation d'une fente d'une plus grande largeur aurait permis d'atteindre un angle final plus important.

Pour les simulations de vidange du cube, il est aussi important de spécifier que la valeur du travail d'adhésion particule-paroi utilisée lors des tests de vérification ne semblait pas adéquate. En effet, avec une valeur de $1 \cdot 10^{-9} \text{ J/m}^2$, les simulations s'arrêtaient subitement lors de la décharge du cube, au moment où les particules qui s'écoulaient entraient en contact avec la paroi

inférieure du cube de récupération. Pour contrer ce problème, une valeur de $0,008 \text{ J/m}^2$ a dû être utilisée pour l'interaction particule-paroi, ce qui correspond approximativement à $Bo = 3$. L'impact de l'utilisation de cette valeur n'est pas connu, cependant il est peu probable que l'écoulement au niveau de l'orifice en soit grandement affecté. De plus, cette valeur a été sélectionnée, car il s'agit de la plus petite valeur possible qui a permis aux simulations de bien fonctionner. Il s'agit probablement d'un problème lié à la parallélisation du code DEM modifié.

Des tests de reproductibilité ont aussi été menés. Les résultats de l'état final de ces tests sont présentés à la figure 4-22 pour des nombres de Bo de 0, 0,5, 15, 20 et 65.



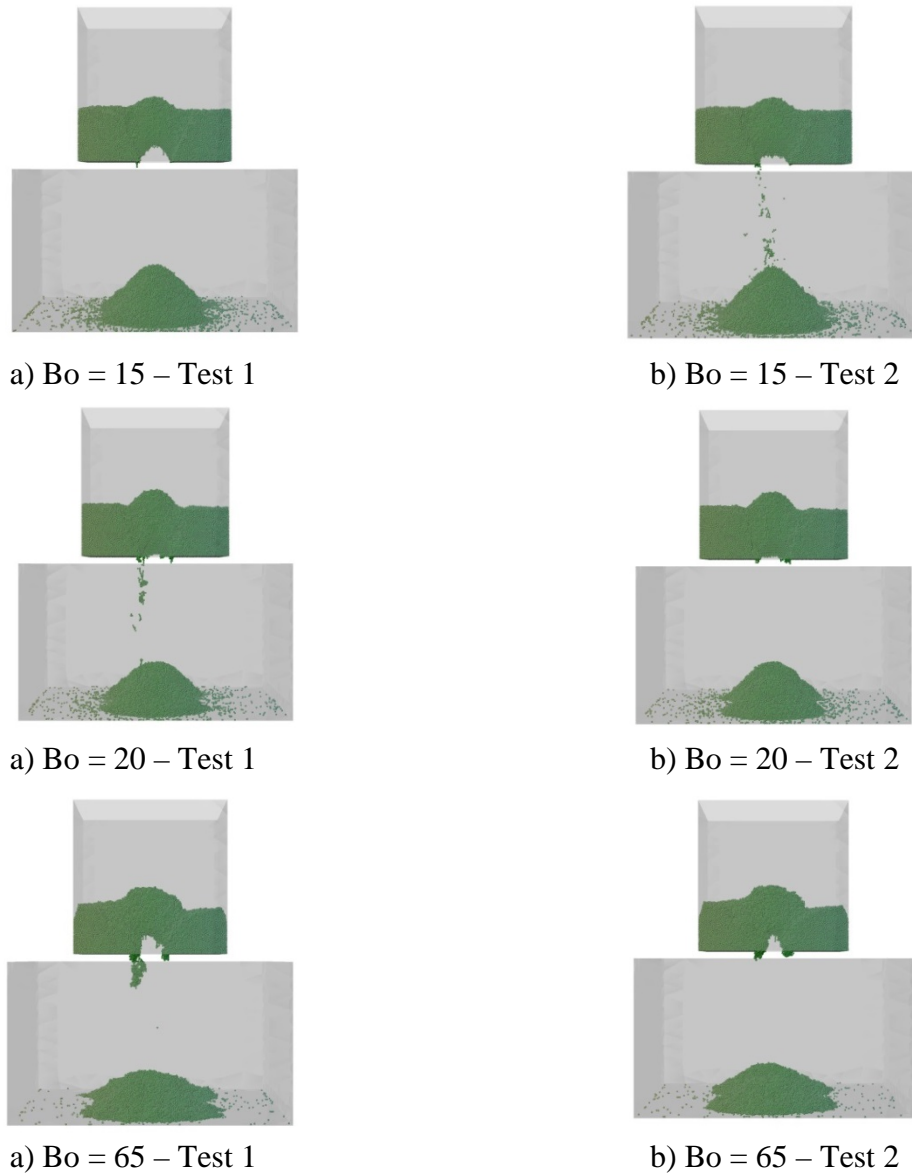


Figure 4-22: Tests de reproductibilité pour les tests d'angle de repos

Il a été constaté que l'écoulement des particules ne s'effectue pas exactement de manière identique. Ceci peut s'expliquer par le fait qu'il s'agit d'un système chaotique et que l'erreur numérique varie exponentiellement avec le pas de temps. Par contre, les états finaux obtenus pour l'ensemble des simulations présentées à la figure 4-22 sont similaires. Il se peut aussi que la manière dont les calculs sont effectués sur la grappe de calculs (calculs en parallèle) ait aussi un impact considérable sur la variabilité des résultats obtenus.

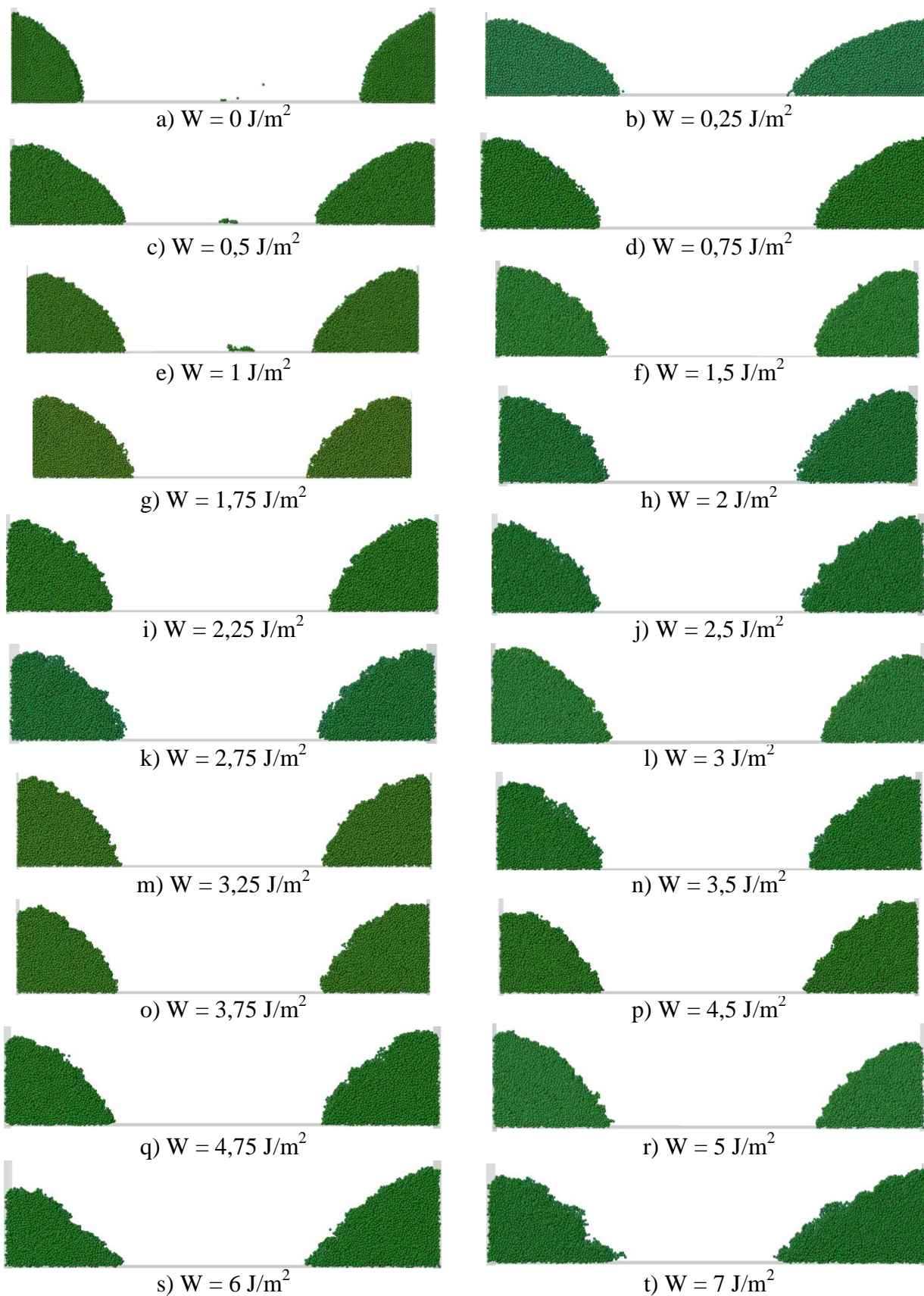
4.2.2 Dilatation de volume dans le sphéroniseur

Les tests de dilatation de volume présentés dans la section 3.4.3 ont été effectués dans le sphéroniseur et consistent en une étude préliminaire. Sur les 36 simulations prévues, 26 ont été complétées avec succès. En effet, pour une dizaine de tests, une erreur de segmentation était obtenue. Ce problème est généralement lié à une utilisation d'un emplacement mémoire qui n'est pas alloué au programme informatique. Les tests complétés et non complétés sont présentés au tableau 4.1.

Tests complétés		Tests non complétés
W (J/m ²)	W (J/m ²)	W (J/m ²)
0	3,5	1,25
0,25	3,75	4
0,5	4,5	4,25
0,75	4,75	11
1	5	13
1,5	6	15
1,75	7	17
2	8	18
2,25	9	19
2,5	10	20
2,75	12	
3	14	
3,25	16	

Tableau 4.1: Tests complétés et non complétés pour la dilatation de volume

Dans le cadre de la présente étude, la cause exacte de l'erreur de segmentation n'a pas été déterminée. Cependant, puisque tous les tests dont la valeur du travail d'adhésion dépasse 16 J/m² n'ont pas fonctionnés, il est fort possible que l'erreur soit causée par un problème dans le code informatique. Ceci serait à examiner davantage, car des simulations avec de fortes valeurs de travail d'adhésion étaient possibles lors des tests d'angle de repos à la section 4.2.1. Les profils de surface dans la direction azimutale sont présentés à la figure 4-23 pour les tests complétés avec succès.



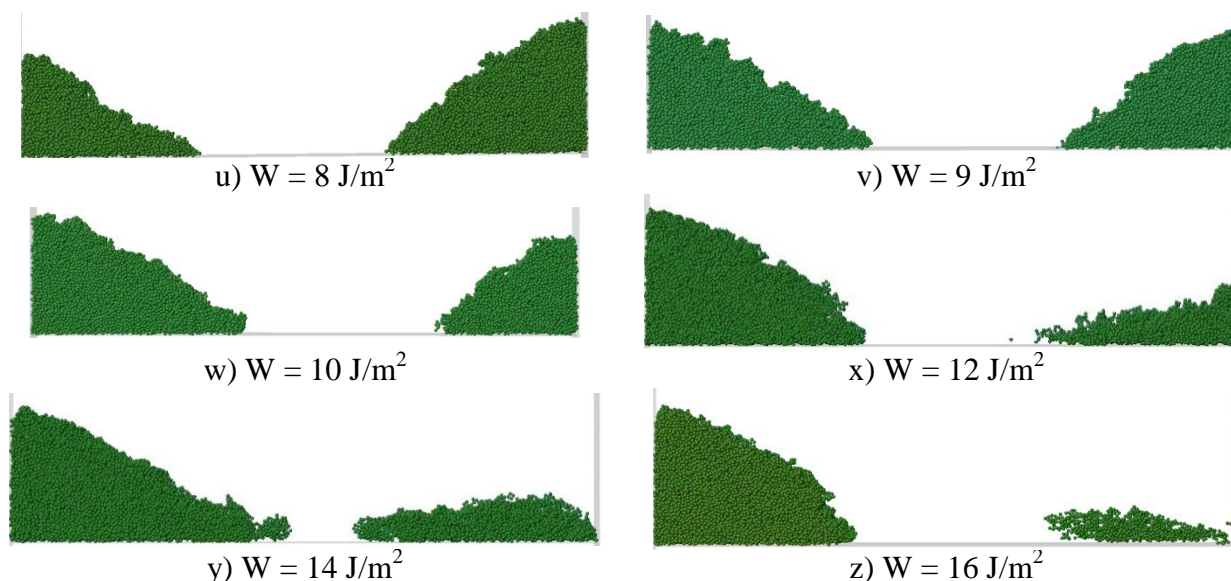


Figure 4-23: Profils du lit de particules dans le sphéroniseur selon une coupe dans la direction azimutale, pour différentes valeurs de travail d'adhésion

En l'absence de forces cohésives, soit lorsque $W = 0 \text{ J/m}^2$, il est facile de constater que le profil de surface est lisse et semble uniforme. L'effet de la force cohésive commence à être plus apparent à partir de $W = 0,75 \text{ J/m}^2$, puisque le profil est moins uniforme et que des agglomérats de particules se forment. Ensuite, plus le travail d'adhésion augmente, moins le profil de surface est lisse et uniforme. À partir de $W = 6 \text{ J/m}^2$, le profil de surface, selon les résultats obtenus, se modifie de sorte que l'apparence est plutôt triangulaire. Enfin, à partir de $W = 12 \text{ J/m}^2$, le lit de particules ne prend plus l'aspect d'une forme toroïdale uniforme. À ce moment, la force cohésive entre les particules est telle qu'elle surpasse énormément les autres forces. Cette perte de symétrie pourrait s'expliquer par la manière dont les particules sont ajoutées au sphéroniseur. En effet, le bloc de particules qui est ajouté n'est pas directement dans le milieu du sphéroniseur. De plus, la plaque du bas était déjà en rotation à ce moment. Ceci est illustré à la figure 4-24.

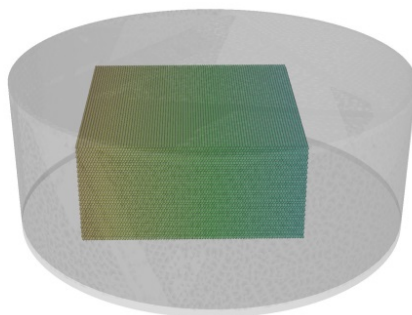
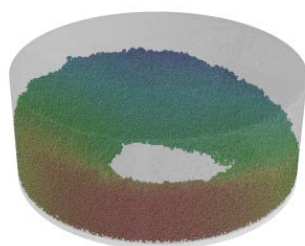
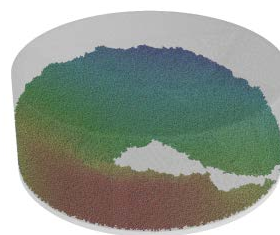


Figure 4-24: Ajout du bloc de particules dans le sphéroniseur

La transition entre $W = 12 \text{ J/m}^2$ et $W = 14 \text{ J/m}^2$ est illustrée à la figure 4-25.



a) $W = 12 \text{ J/m}^2$



b) $W = 14 \text{ J/m}^2$

Figure 4-25: Transition entre $W = 12 \text{ J/m}^2$ et $W = 14 \text{ J/m}^2$ dans le sphéroniseur

Le volume de la forme toroïdale a été calculé pour chacune des 26 simulations qui ont convergées (fig. 4-26). Les résultats sont aussi présentés selon le pourcentage de dilatation du volume par rapport au volume obtenu lorsqu'il y a absence de force cohésive (fig. 4-27).

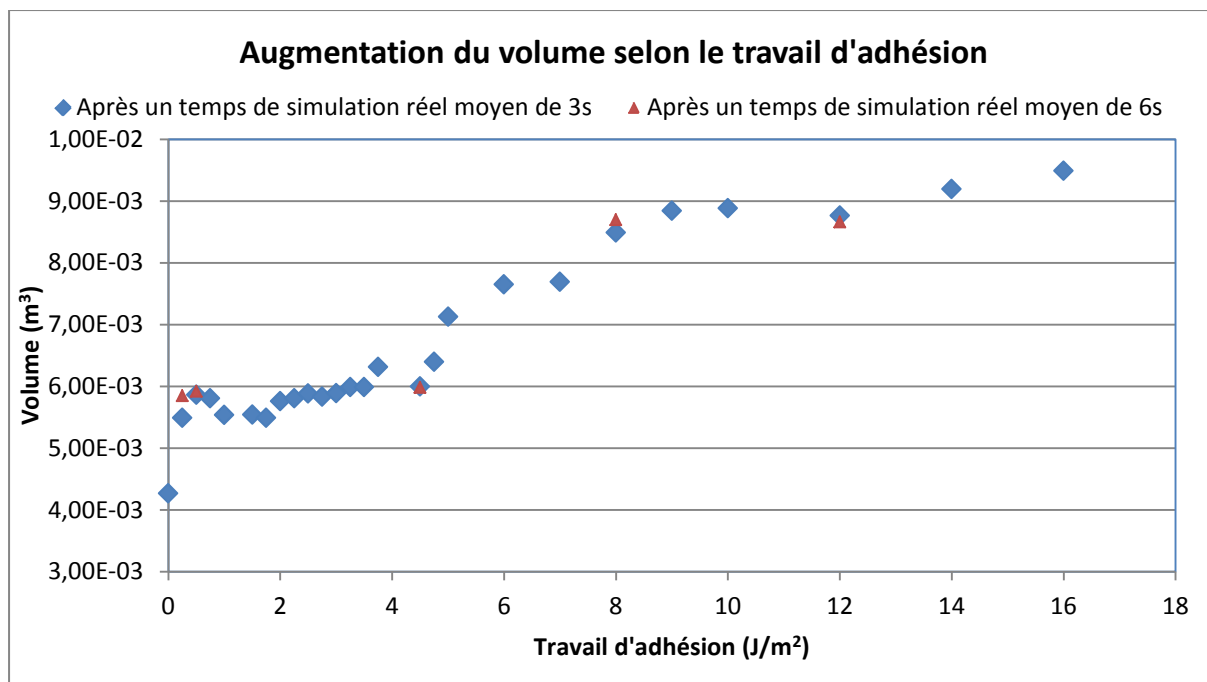


Figure 4-26: Volume du lit de particules dans le sphéroniseur en fonction du travail d'adhésion

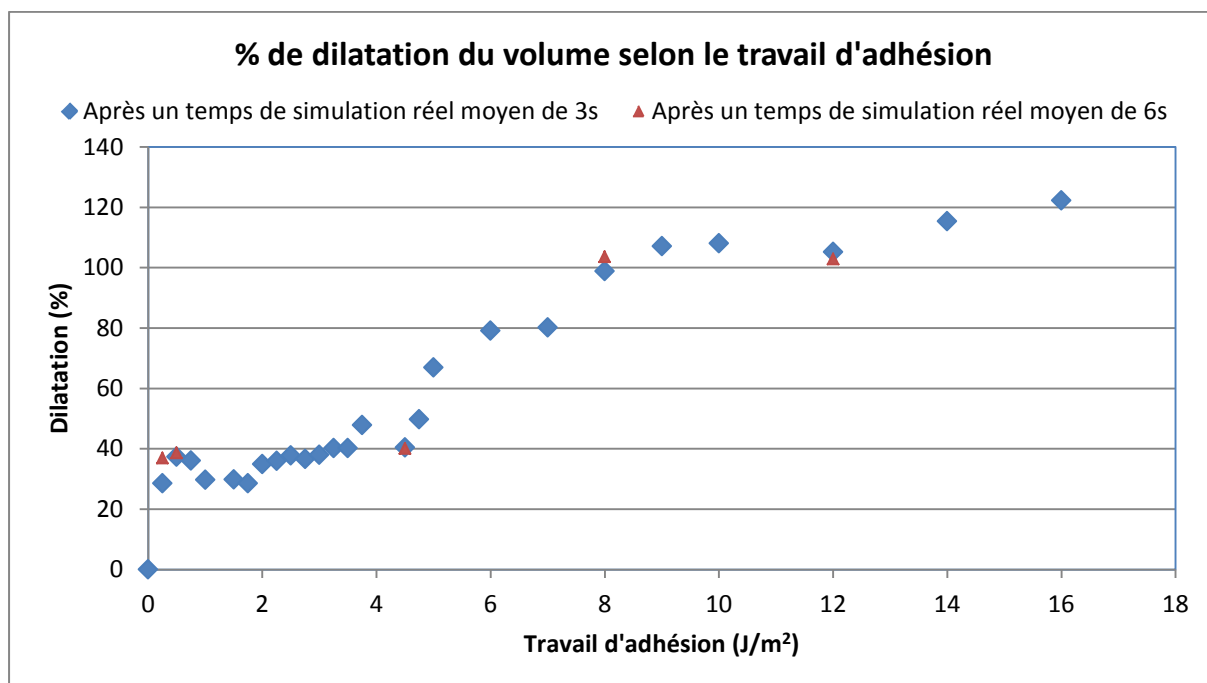


Figure 4-27: Pourcentage de dilatation du volume du lit de particules dans le sphéroniseur en fonction du travail d'adhésion

Selon les résultats, il est apparent que dans l'ensemble, le volume du lit de particules augmente avec la force cohésive, ce qui est cohérent avec la littérature (Alexander, *et al.*, 2006; Faqih, Chaudhuri, Alexander, *et al.*, 2006; Faqih, Chaudhuri, Muzzio, *et al.*, 2006; R. Yang, *et al.*, 2007). Cependant, avec les résultats obtenus, il n'est pas possible d'établir une règle spécifique, puisque le volume ne semble pas se dilater selon une tendance précise. Les résultats obtenus représentent un temps de simulation réel moyen d'environ 3 secondes et les résultats des simulations supplémentaires dont le temps réel moyen est d'environ 6 secondes sont aussi présentés dans les mêmes graphiques (fig. 4-26 et 4-27). Ainsi, il s'avère que selon les résultats obtenus, le volume semble stable après un temps de 3 secondes, puisque la variation entre 3 secondes et 6 secondes est négligeable. Pour appuyer ces propos, davantage de simulations ont été effectuées avec une valeur de $0,5 \text{ J/m}^2$ pour vérifier la variation du volume du lit de particules dans le temps. Les résultats sont présentés à la figure 4-28.

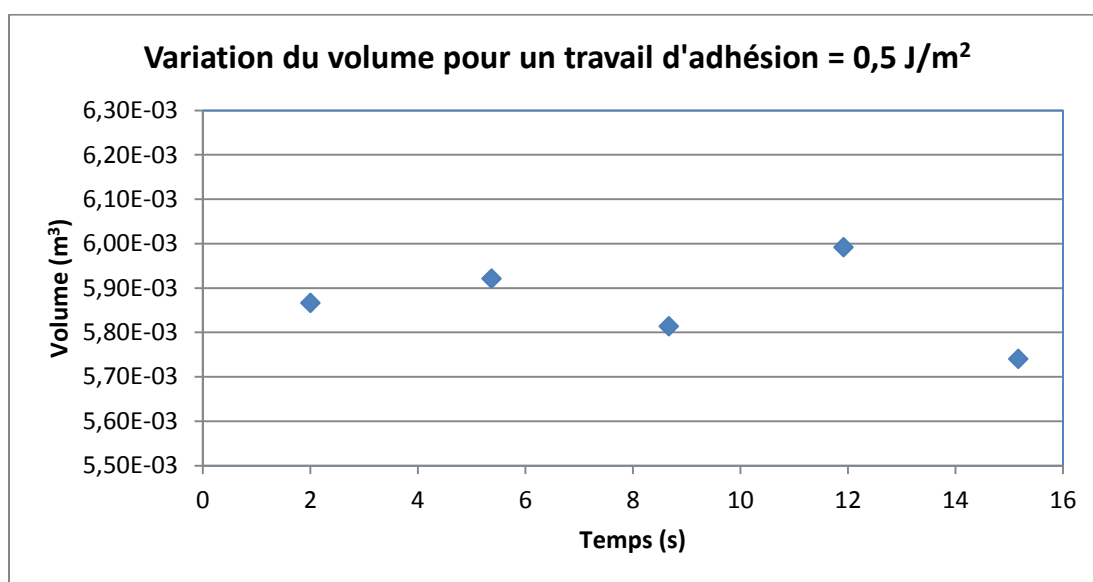


Figure 4-28: Variation du volume du lit de particules dans le sphéroniseur pour $W = 0,5 \text{ J/m}^2$

Après un temps réel de 15 secondes, il semble que le volume du lit de particules ne soit pas tout à fait stable. Tout de même, il n'est pas aisé de comparer avec la littérature, car même si les résultats obtenus présentent la même tendance, l'ordre de grandeur est différent. Dans l'étude de Faqih, Chaudhuri, Muzzio, *et al.* (2006) qui concerne la dilatation du lit de particules dans un

tambour rotatif, le degré de maximal de dilatation obtenue est d'environ 25%, alors que dans la présente étude, il est près de 125%. Cependant, l'ordre de grandeur des forces utilisées n'est pas indiqué et fort probablement inférieur à celle dans ce projet. Aussi, il n'est pas possible selon la présente étude de déterminer si le degré de dilatation atteint éventuellement un plateau ou s'il continue à augmenter.

En outre, les profils de vitesse dans la direction azimutale pour les simulations dans le sphéroniseur sont présentés à la figure 4-30. La légende pour la figure 4-30 est présentée à la figure 4-29. Plus la couleur tend vers le rouge, plus la vitesse est élevée. À l'opposé, plus la couleur tend vers le bleu, plus la vitesse est faible.

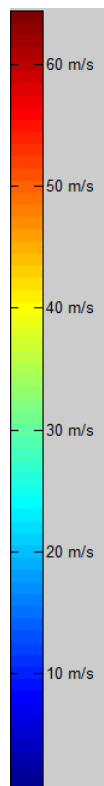
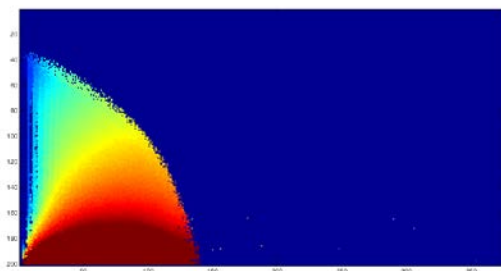
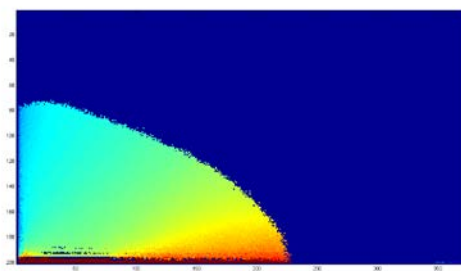
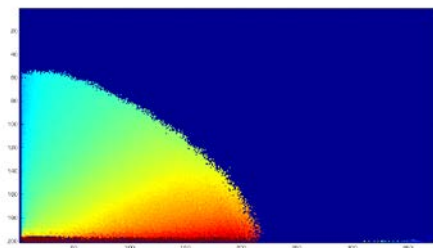
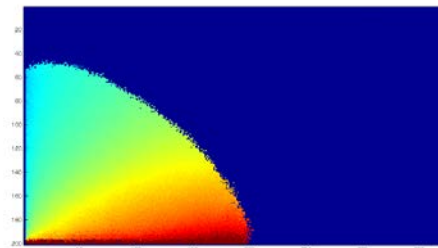
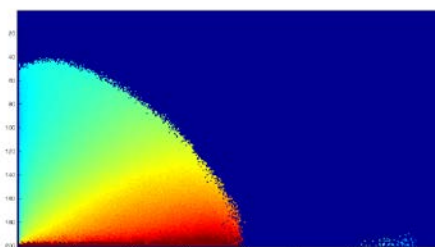
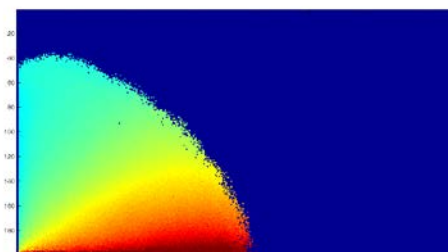
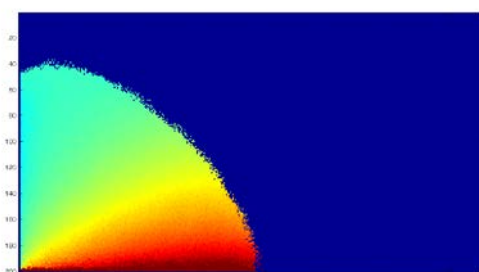
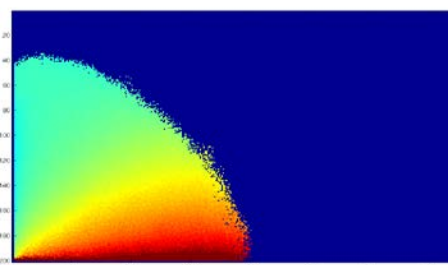
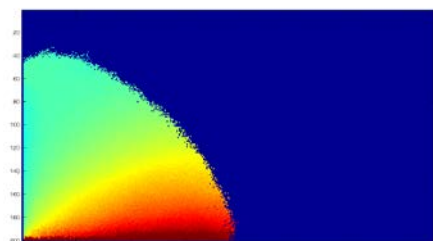
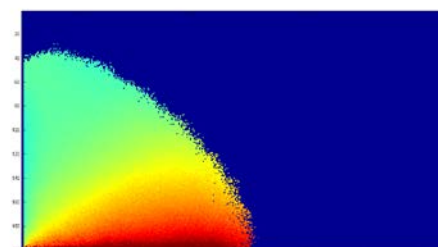
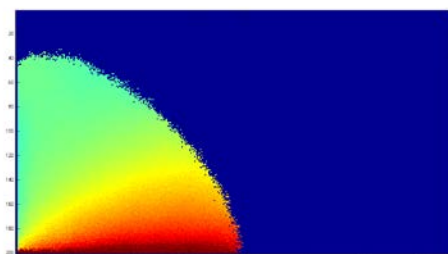
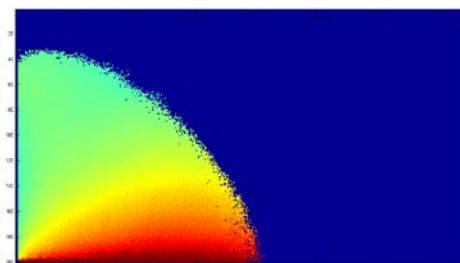
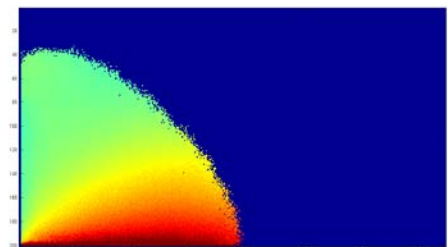
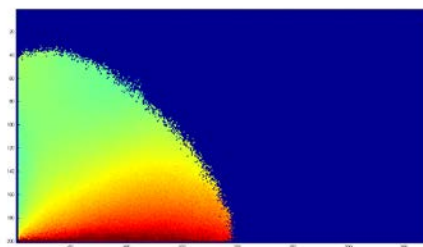
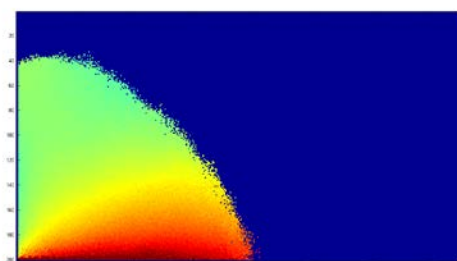
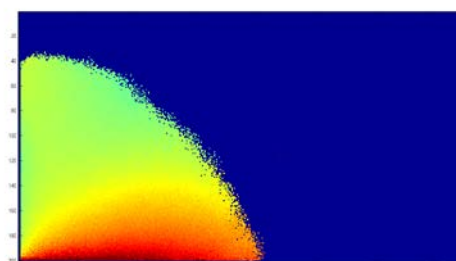
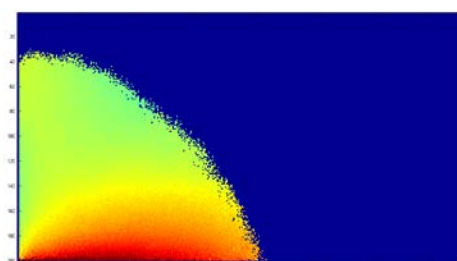
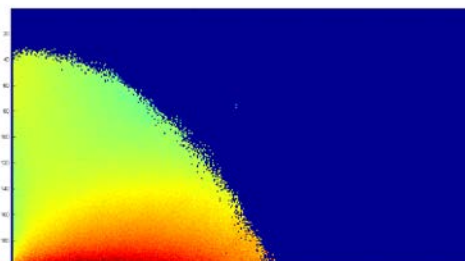
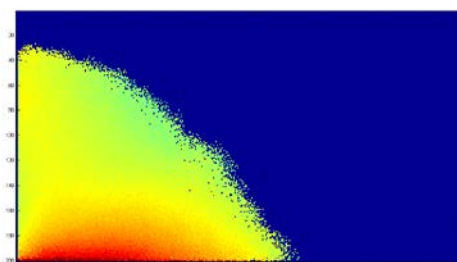
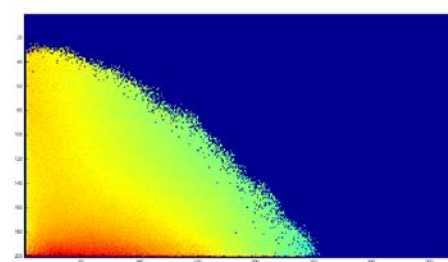


Figure 4-29: Légende pour les profils de vitesse

a) $W = 0 \text{ J/m}^2$ b) $W = 0,25 \text{ J/m}^2$ c) $W = 0,5 \text{ J/m}^2$ d) $W = 0,75 \text{ J/m}^2$ e) $W = 1 \text{ J/m}^2$ f) $W = 1,5 \text{ J/m}^2$ g) $W = 1,75 \text{ J/m}^2$ h) $W = 2 \text{ J/m}^2$ i) $W = 2,25 \text{ J/m}^2$ j) $W = 2,5 \text{ J/m}^2$

k) $W = 2,75 \text{ J/m}^2$ l) $W = 3 \text{ J/m}^2$ m) $W = 3,25 \text{ J/m}^2$ n) $W = 3,5 \text{ J/m}^2$ o) $W = 3,75 \text{ J/m}^2$ p) $W = 4,5 \text{ J/m}^2$ q) $W = 4,75 \text{ J/m}^2$ r) $W = 5 \text{ J/m}^2$ s) $W = 6 \text{ J/m}^2$ t) $W = 7 \text{ J/m}^2$

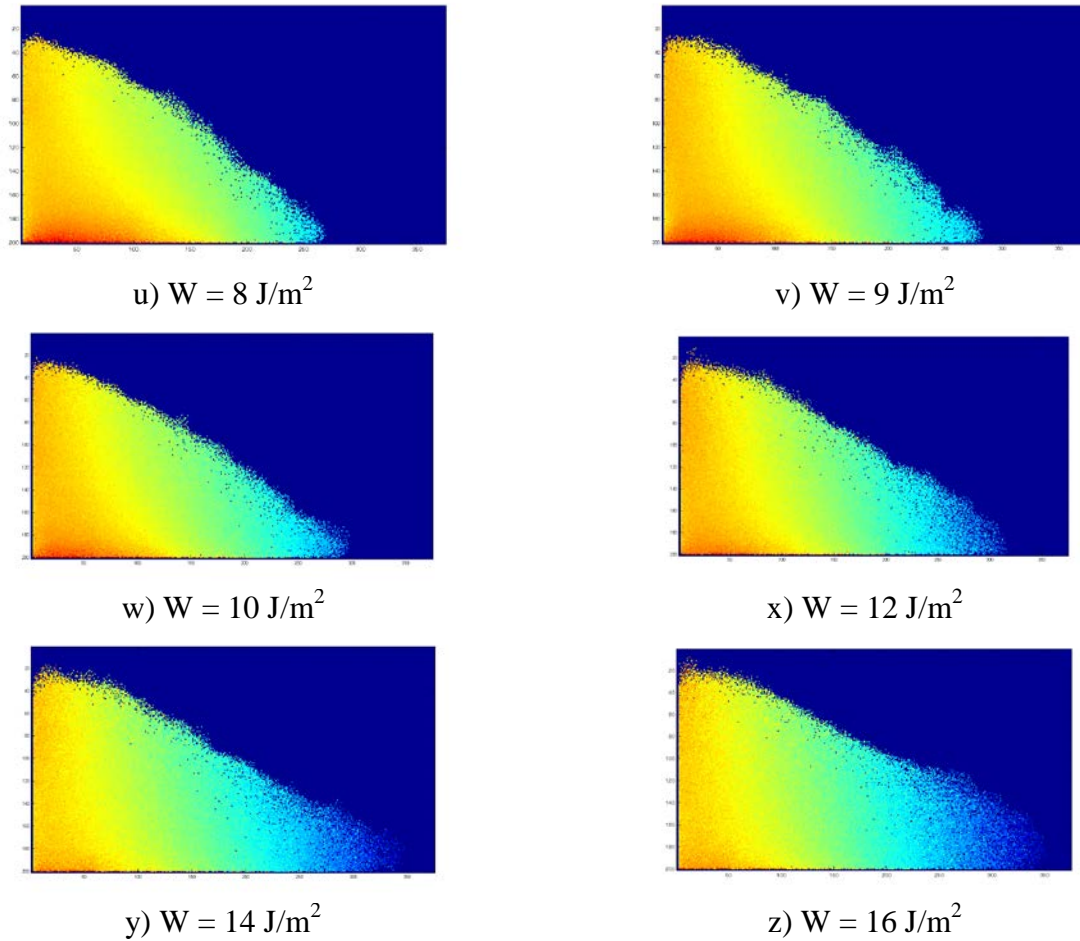


Figure 4-30: Profils de vitesse en fonction du travail d'adhésion dans le sphéroniseur

Il est possible de remarquer que les profils de vitesse sont très différents entre l'écoulement libre représenté à la figure 4-29a, c'est-à-dire lorsque les forces cohésives sont absentes, et l'écoulement fortement cohésif représenté à la figure 4-29z. Lorsque les forces cohésives sont absentes ou faibles, la vitesse des particules près de la paroi inférieure en rotation est élevée, puisqu'elles sont soumises à un cisaillement très important. Plus la cohésion augmente, plus celle-ci surpasse les autres forces en jeux. Ainsi, les particules restent davantage collées les unes sur les autres. La vitesse de ces dernières est donc grandement diminuée près de la paroi inférieure en rotation, ainsi qu'à l'intérieur même du lit de particules.

4.2.3 Résumé de l'étape d'évaluation de la précision

L'étape d'évaluation de la précision a comporté deux étapes distinctes. Dans un premier temps, des simulations d'angles de repos ont été complétées et analysées. Il s'avère que selon les résultats obtenus, l'angle de repos augmente en fonction de la force cohésive entre les particules, ce qui correspond à l'information recueillie dans la littérature. Dans un deuxième temps, une étude préliminaire de la dilatation du volume du lit de particules dans un sphéroniseur fut effectuée. Les résultats obtenus indiquent que le volume du lit de particules augmente avec la force cohésive, ce qui est aussi qualitativement en accord avec la littérature.

CHAPITRE 5 CONCLUSION

5.1 Synthèse des travaux

L'objectif principal de ce projet était la modélisation numérique de l'écoulement de particules cohésives à l'aide de la méthode des éléments discrets. Inspiré par des manipulations expérimentales qui ont permis de déterminer qu'il était possible de faire varier les forces cohésives entre les particules en les enrobant d'un polymère, la prochaine étape était de procéder à des simulations. Plus particulièrement, les objectifs spécifiques étaient de démontrer l'augmentation de l'angle de repos statique en fonction des forces cohésives et de démontrer l'expansion de volume due aux forces cohésives à l'intérieur d'un sphéroniseur. Pour ce faire, un modèle de cohésion pour la direction normale du contact et un second pour la direction tangentielle ont été sélectionnés et implantés dans le code DEM original de l'URPEI. Ensuite, des tests de vérification du code ont été effectués pour valider qualitativement la direction normale du contact entre les particules. Aussi, des tests d'angle de repos et de dilatation de volume ont été complétés. Dans un premier temps, les tests d'angles de repos réalisés par la vidange d'un cube possédant une fente sur la paroi inférieure ont permis de vérifier que l'angle de repos augmente en fonction de la force cohésive entre les particules. De plus, les tests de dilatation de volume effectués dans un mélangeur rotatif ont permis aussi de constater l'augmentation du volume du lit de particules en fonction de la force cohésive.

5.2 Limitations et recommandations

Puisque les écoulements de particules avec la présence de forces cohésives ne sont pas encore parfaitement compris et qu'il s'agit d'un sujet de recherche récent, il va de soi que ce projet n'est pas complet. Il s'agit d'une étude préliminaire visant à mieux comprendre l'impact des forces cohésives sur l'écoulement de particules. Suite à cela, il est donc possible de faire les recommandations suivantes pour des travaux futurs :

- Déterminer la raison de l'erreur de segmentation obtenue dans plus d'une dizaine de simulations avec le mélangeur rotatif ;
- Déterminer la raison pour laquelle le nouveau code informatique ne fonctionne pas si la valeur du travail d'adhésion est trop petite pour une interaction particule-paroi ;
- Effectuer des tests de vérification pour la direction tangentielle du contact avec le nouveau code informatique ;
- Valider les tests de vérification avec des solutions analytiques ;
- Étudier davantage les modèles à utiliser pour la force normale dissipative et pour la force tangentielle dissipative ;
- Vérifier la contribution de la force tangentielle par rapport à la force normale pour des écoulements de particules cohésives ;
- Effectuer des simulations de plus longues durées dans le mélangeur rotatif pour être en mesure d'effectuer des comparaisons adéquates avec les résultats expérimentaux ;
- Implanter un modèle de force basé sur les ponts liquides pour pouvoir être en mesure de mieux se comparer avec la littérature, puisqu'il y a beaucoup de recherches effectuées avec des ponts liquides / forces capillaires.

BIBLIOGRAPHIE

- Aarons, L. R., Sun, J., & Sundaresan, S. (2009). Unsteady Shear of Dense Assemblies of Cohesive Granular Materials under Constant Volume Conditions. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49(11), 5153-5165.
- Adams, M. J., & Perchard, V. (1985). The cohesive forces between particles with interstitial liquid. *Inst. Chem. Eng. Symp.*, 91, 147-160.
- Akiyama, T., Aoki, K. M., Iguchi, T., & Nishimoto, K. (1996). A fractal property of vertically vibrated beds of granules. *Chemical Engineering Science*, 51(13), 3551-3553.
- Alexander, A., Chaudhuri, B., Faqih, A., Muzzio, F., Davies, C., & Tomassone, M. (2006). Avalanching flow of cohesive powders. *Powder Technology*, 164(1), 13-21.
- Alizadeh, E., Bertrand, F., & Chaouki, J. (2013). Development of a granular normal contact force model based on a non-Newtonian liquid filled dashpot. *Powder Technology*, 237(0), 202-212.
- Anand, A., Curtis, J. S., Wassgren, C. R., Hancock, B. C., & Ketterhagen, W. R. (2009). Predicting discharge dynamics of wet cohesive particles from a rectangular hopper using the discrete element method (DEM). *Chemical Engineering Science*, 64(24), 5268-5275.
- Antony, S. (2000). Evolution of force distribution in three-dimensional granular media. *Physical Review E*, 63(1).
- Aoki, K. M., & Akiyama, T. (1995). Simulation Studies of Pressure and Density Wave Propagations in Vertically Vibrated Beds of Granules. *Physical Review E*, 52(3), 3288-3291.
- Asmar, B. N., Langston, P. A., Matchett, A. J., & Walters, J. K. (2002). Validation tests on a distinct element model of vibrating cohesive particle systems. *Computers & Chemical Engineering*, 26(6), 785-802.
- Bertrand, F., Leclaire, L. A., & Levecque, G. (2005). DEM-based models for the mixing of granular materials. *Chemical Engineering Science*, 60(8-9), 2517-2531.
- Bharat, B. (1998). Nanomechanical Properties of Solid Surfaces and Thin Films *Handbook of Micro/Nano Tribology, Second Edition*: CRC Press.
- Bouffard, J., Bertrand, F., Chaouki, J., & Giasson, S. (2012a). Control of particle cohesion with a polymer coating and temperature adjustment. *AIChE Journal*, 58(12), 3685–3696.
- Bouffard, J., Cabana, A., Chaouki, J., & Bertrand, F. (2012b). Experimental investigation of the effect of particle cohesion on the flow dynamics in a spheronizer. *AIChE Journal*, n/a-n/a.

- Bridgwater, J. (2003). The dynamics of granular materials - towards grasping the fundamentals. *Granular Matter*, 4(4), 175-181.
- Brilliantov, N. V., Albers, N., Spahn, F., & Poschel, T. (2007). Collision dynamics of granular particles with adhesion. *Physical Review E*, 76(5).
- Calvert, G., Hassanpour, A., & Ghadiri, M. (2011). Mechanistic analysis and computer simulation of the aerodynamic dispersion of loose aggregates. *Chemical Engineering Research & Design*, 89(5A), 519-525.
- Chaudhuri, B., Mehrotra, A., Muzzio, F. J., & Tomassone, M. S. (2006). Cohesive effects in powder mixing in a tumbling blender. *Powder Technology*, 165(2), 105-114.
- Chen, Y., Jallo, L., Quintanilla, M. A. S., & Dave, R. (2010). Characterization of particle and bulk level cohesion reduction of surface modified fine aluminum powders. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 361(1-3), 66-80.
- Chu-Wan, H. (1998). From Long-Range Interaction to Solid-Body Contact Between Colloidal Surfaces During Forming. *Journal of the European Ceramic Society*, 18(14), 2159-2167.
- Chung, Y. C., & Ooi, J. Y. (2011). Benchmark tests for verifying discrete element modelling codes at particle impact level. *Granular Matter*, 13(5), 643-656.
- Cleary, P. W., & Sawley, M. L. (2002). DEM modelling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particle shape on hopper discharge. *Applied Mathematical Modelling*, 26(2), 89-111.
- Corwin, E. I. (2008). Granular flow in a rapidly rotated system with fixed walls. *Physical Review E*, 77(3).
- Cundall, P. A., & Strack, O. D. L. (1979). A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29(1), 47-65.
- Delenne, J.-Y., El Youssoufi, M. S., Cherblanc, F., & Bénet, J.-C. (2004). Mechanical behaviour and failure of cohesive granular materials. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 28(15), 1577-1594.
- Deresiewicz, H., & Mindlin, R. D. (1952). *Elastic spheres in contact under varying oblique forces*.
- Derjaguin, B. V., & Landau, L. (1941). Theory of the Stability of Strongly Charged Lyophobic Sols and of the Adhesion of Strongly Charged Particles in Solutions of Electrolytes. *Acta Phys. Chim. URSS*, 14, 633-662.
- Derjaguin, B. V., Muller, V. M., & Toporov, Y. P. (1975). Effect of Contact Deformations on the Adhesion of Particles. *Progress in Surface Science*, 45(1-4), 131-143.

- Dong, K. J., Zou, R. P., Yang, R. Y., Yu, A. B., & Roach, G. (2009). DEM simulation of cake formation in sedimentation and filtration. *Minerals Engineering*, 22(11), 921-930.
- Dubey, A., Sarkar, A., Ierapetritou, M., Wassgren, C. R., & Muzzio, F. J. (2011). Computational Approaches for Studying the Granular Dynamics of Continuous Blending Processes, 1 - DEM Based Methods. *Macromolecular Materials and Engineering*, 296(3-4), 290-307.
- El Shamy, U., & Gröger, T. (2008). Micromechanical aspects of the shear strength of wet granular soils. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 32(14), 1763-1790.
- Faqih, A., Chaudhuri, B., Alexander, A. W., Davies, C., Muzzio, F. J., & Silvina Tomassone, M. (2006). An experimental/computational approach for examining unconfined cohesive powder flow. *International journal of pharmaceutics*, 324(2), 116-127.
- Faqih, A., Chaudhuri, B., Muzzio, F., Tomassone, M. S., Alexander, A., & Hammond, S. (2006). Flow - induced dilation of cohesive granular materials. *AIChE Journal*, 52(12), 4124-4132.
- Figuerola, I., Li, H., & McCarthy, J. (2009). Predicting the impact of adhesive forces on particle mixing and segregation. *Powder Technology*, 195(3), 203-212.
- Figuerola, I., & McCarthy, J. J. (2010). Using Janus Particles to Control Mixing and Segregation of Adhesive Particle Systems. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49(11), 5204-5214.
- Fisher, R. A. (1926). On the capillary forces in an ideal soil; correction of formulae given by W. B. Haines. *The Journal of Agricultural Science*, 16(03), 492-505.
- Forsyth, A. J., Hutton, S., & Rhodes, M. J. (2002). Effect of cohesive interparticle force on the flow characteristics of granular material. *Powder Technology*, 126(2), 150-154.
- Fraige, F. Y., & Langston, P. A. (2004). Integration schemes and damping algorithms in distinct element models. *Advanced Powder Technology*, 15(2), 227-245.
- Gopalkrishnan, P., Manaszloczower, I., & Feke, D. (2005). Investigating dispersion mechanisms in partially infiltrated agglomerates: Interstitial fluid effects. *Powder Technology*, 156(2-3), 111-119.
- Grof, Z., Cook, J., Lawrence, C. J., & Štěpánek, F. (2009). The interaction between small clusters of cohesive particles and laminar flow: Coupled DEM/CFD approach. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 66(1-2), 24-32.
- Groger, T., Tuzun, U., & Heyes, D. M. (2003). Modelling and measuring of cohesion in wet granular materials. *Powder Technology*, 133(1-3), 203-215.

- Hassanpour, A., & Ghadiri, M. (2007). Characterisation of flowability of loosely compacted cohesive powders by indentation. *Particle & Particle Systems Characterization*, 24(2), 117-123.
- Higashitani, K., Iimura, K., & Sanda, H. (2001). Simulation of deformation and breakup of large aggregates in flows of viscous fluids. *Chemical Engineering Science*, 56(9), 2927-2938.
- Hong, C. W. (1997). New concept for simulating particle packing in colloidal forming processes. *Journal of the American Ceramic Society*, 80(10), 2517-2524.
- Hsiau, S. S., & Yang, S. C. (2003). Numerical simulation of self-diffusion and mixing in a vibrated granular bed with the cohesive effect of liquid bridges. *Chemical Engineering Science*, 58(2), 339-351.
- Iordanoff, I., Fillot, N., & Berthier, Y. (2005). Numerical study of a thin layer of cohesive particles under plane shearing. *Powder Technology*, 159(1), 46-54.
- Iordanoff, I., Seve, B., & Berthier, Y. (2002). Solid Third Body Analysis Using a Discrete Approach: Influence of Adhesion and Particle Size on Macroscopic Properties. *Journal of Tribology*, 124(3), 530.
- Jain, K., Shi, D., & McCarthy, J. (2004). Discrete characterization of cohesion in gas-solid flows. *Powder Technology*, 146(1-2), 160-167.
- Jia, T., Zhang, Y., Chen, J. K., & He, Y. L. (2011). Dynamic simulation of granular packing of fine cohesive particles with different size distributions. *Powder Technology*, 218, 76-85.
- Johno, Y., Satomi, M., Nakashima, K., Shigematsu, T., & Ono, B. (2009). Numerical simulation of particle settling and cohesion in liquid. *Journal of Physics: Conference Series*, 147, 012072.
- Johnson, K. L., & Greenwood, J. A. (1997). An Adhesion Map for the Contact of Elastic Spheres. *Journal of Colloid and Interface Science*, 192(2), 326-333.
- Johnson, K. L., Kendall, K., & Roberts, A. D. (1971). Surface Energy and the Contact of Elastic Solids. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 324(1558), 301-313.
- Kafui, D. K., & Thornton, C. (2008). Fully-3D DEM simulation of fluidised bed spray granulation using an exploratory surface energy-based spray zone concept. *Powder Technology*, 184(2), 177-188.
- Kant Pandit, J., Wang, X. S., & Rhodes, M. J. (2007). A DEM study of bubble formation in Group B fluidized beds with and without cohesive inter-particle forces. *Chemical Engineering Science*, 62(1-2), 159-166.
- Kempton, L., Pinson, D., Chew, S., Zulli, P., & Yu, A. (2011). Simulation of macroscopic deformation using a sub-particle DEM approach. *Powder Technology*(0).

- Kosinski, P., & Hoffmann, A. (2011). Extended hard-sphere model and collisions of cohesive particles. *Physical Review E*, 84(3).
- Krugger-Emden, H., Simsek, E., Rickelt, S., Wirtz, S., & Scherer, V. (2007). Review and extension of normal force models for the Discrete Element Method. *Powder Technology*, 171(3), 157-173.
- Kuniaki, G., Hiroaki, M., Shuji, M., & Ko, H. (2006). Adhesive Force of a Single Particle *Powder Technology* (pp. 157-170): CRC Press.
- Lanni, C., Saramago, S. F. P., & Ceccarelli, M. (2002). Optimal design of 3R manipulators by using classical techniques and simulated annealing. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences*, 24, 293-301.
- LCI, C. (2012). LCI Corporation. Retrieved January 24th, 2012, from <http://www.lcicorp.com/>
- Lee, G., Kang, S. K., & Kwon, D. (2008). Characterization of elastic modulus and work of adhesion in elastomeric polymers using microinstrumented indentation technique. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 496(1-2), 494-500.
- Lemieux, A., Leonard, G., Doucet, J., Leclaire, L. A., Viens, F., Chaouki, J., et al. (2008). Large-scale numerical investigation of solids mixing in a V-blender using the discrete element method. *Powder Technology*, 181(2), 205-216.
- Li, Marshall, J. S., Liu, G., & Yao, Q. (2011). Adhesive particulate flow: The discrete-element method and its application in energy and environmental engineering. *Progress in Energy and Combustion Science*, 37(6), 633-668.
- Li, H., & McCarthy, J. (2003). Controlling Cohesive Particle Mixing and Segregation. *Physical Review Letters*, 90(18).
- Li, S. Q., & Marshall, J. S. (2007). Discrete element simulation of micro-particle deposition on a cylindrical fiber in an array. *Journal of Aerosol Science*, 38(10), 1031-1046.
- Li, Y. J., Xu, Y., & Thornton, C. (2005). A comparison of discrete element simulations and experiments for 'sandpiles' composed of spherical particles. *Powder Technology*, 160(3), 219-228.
- Lian, G., Thornton, C., & Adams, M. J. (1993). A Theoretical Study of the Liquid Bridge Forces between Two Rigid Spherical Bodies. *Journal of Colloid and Interface Science*, 161(1), 138-147.
- Lian, G., Thornton, C., & Adams, M. J. (1998). Discrete particle simulation of agglomerate impact coalescence. *Chemical Engineering Science*, 53(19), 3381-3391.

- Limtrakul, S., Rotjanavijit, W., & Vatanatham, T. (2007). Lagrangian modeling and simulation of effect of vibration on cohesive particle movement in a fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, 62(1-2), 232-245.
- Liu, G., Li, S., & Yao, Q. (2010). On the applicability of different adhesion models in adhesive particulate flows. *Frontiers in Energy*, 4(2), 280-280-286.
- Liu, G., Li, S., & Yao, Q. (2011). A JKR-based dynamic model for the impact of micro-particle with a flat surface. *Powder Technology*, 207(1-3), 215-223.
- Luding, S. (2005). Shear flow modeling of cohesive and frictional fine powder. *Powder Technology*, 158(1-3), 45-50.
- Luding, S. (2008). Cohesive, frictional powders: contact models for tension. *Granular Matter*, 10(4), 235-246.
- Luding, S., & Alonso-Marroquín, F. (2011). The critical-state yield stress (termination locus) of adhesive powders from a single numerical experiment. *Granular Matter*, 13(2), 109-119.
- Malvern. (2013). Malvern. Retrieved May 30th 2013, from http://www.malvern.com/labeng/industry/colloids/dlvo_theory.htm
- Marshall, J. S. (2007). Particle aggregation and capture by walls in a particulate aerosol channel flow. *Journal of Aerosol Science*, 38(3), 333-351.
- Marshall, J. S. (2009). Discrete-element modeling of particulate aerosol flows. *Journal of Computational Physics*, 228(5), 1541-1561.
- Mary, P., Chateauminois, A., & Fretigny, C. (2006). Deformation of elastic coatings in adhesive contacts with spherical probes. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 39(16), 3665-3673.
- Matuttis, H. G., & Schinner, A. (2001). Particle simulation of cohesive granular materials. *International Journal of Modern Physics C*, 12(7), 1011-1021.
- McCarthy. (2003). Micro-modeling of cohesive mixing processes. *Powder Technology*, 138(1), 63-67.
- McCarthy, Jasti, V., Marinack, M., & Higgs, C. F. (2010). Quantitative validation of the discrete element method using an annular shear cell. *Powder Technology*, 203(1), 70-77.
- McCarthy, & Ottino, J. M. (1998). Particle dynamics simulation: a hybrid technique applied to granular mixing. *Powder Technology*, 97(2), 91-99.
- Mehrotra, A., Chaudhuri, B., Faqih, A., Tomassone, M. S., & Muzzio, F. J. (2009). A modeling approach for understanding effects of powder flow properties on tablet weight variability. *Powder Technology*, 188(3), 295-300.

- Mikami, T., Kamiya, H., & Horio, M. (1998). Numerical simulation of cohesive powder behavior in a fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, 53(10), 1927-1940.
- Moon, S. J., Kevrekidis, I. G., & Sundaresan, S. (2006). Particle simulation of vibrated gas-fluidized beds of cohesive fine powders. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 45(21), 6966-6977.
- Moreno, R., Ghadiri, M., & Antony, S. J. (2003). Effect of the impact angle on the breakage of agglomerates: a numerical study using DEM. *Powder Technology*, 130(1-3), 132-137.
- Morenoatanasio, R., Antony, S., & Ghadiri, M. (2005). Analysis of flowability of cohesive powders using Distinct Element Method. *Powder Technology*, 158(1-3), 51-57.
- Mouraille, O., Herbst, O., & Luding, S. (2009). Sound propagation in isotropically and uni-axially compressed cohesive, frictional granular solids. *Engineering Fracture Mechanics*, 76(6), 781-792.
- Muguruma, Y., Tanaka, T., & Tsuji, Y. (2000). Numerical simulation of particulate flow with liquid bridge between particles (simulation of centrifugal tumbling granulator). *Powder Technology*, 109(1-3), 49-57.
- Nase, S. T., Vargas, W. L., Abatan, A. A., & McCarthy, J. J. (2001). Discrete characterization tools for cohesive granular material. *Powder Technology*, 116(2-3), 214-223.
- Pandit, J. K., Wang, X. S., & Rhodes, M. J. (2005). Study of Geldart's Group A behaviour using the discrete element method simulation. *Powder Technology*, 160(1), 7-14.
- Pandit, J. K., Wang, X. S., & Rhodes, M. J. (2006). On Geldart Group A behaviour in fluidized beds with and without cohesive interparticle forces: A DEM study. *Powder Technology*, 164(3), 130-138.
- Prokopovich, P., & Perni, S. (2011). Comparison of JKR- and DMT-based multi-asperity adhesion model: Theory and experiment. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 383(1-3), 95-101.
- Remy, B., Khinast, J. G., & Glasser, B. J. (2012). Wet granular flows in a bladed mixer: Experiments and simulations of monodisperse spheres. *AIChE Journal*, n/a-n/a.
- Rhodes, M. J., Wang, X. S., Nguyen, M., Stewart, P., & Liffman, K. (2001a). Onset of cohesive behaviour in gas fluidized beds: a numerical study using DEM simulation. *Chemical Engineering Science*, 56(14), 4433-4438.
- Rhodes, M. J., Wang, X. S., Nguyen, M., Stewart, P., & Liffman, K. (2001b). Use of discrete element method simulation in studying fluidization characteristics: influence of interparticle force. *Chemical Engineering Science*, 56(1), 69-76.

- Richefeu, V., El Youssoufi, M. S., Peyroux, R., & Radjaï, F. (2008). A model of capillary cohesion for numerical simulations of 3D polydisperse granular media. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 32(11), 1365-1383.
- Sarkar, A., & Wassgren, C. (2010). Continuous blending of cohesive granular material. *Chemical Engineering Science*, 65(21), 5687-5698.
- Sato, Y., Nakamura, H., & Watano, S. (2008). Numerical analysis of agitation torque and particle motion in a high shear mixer. *Powder Technology*, 186(2), 130-136.
- Savkoor, A. R., & Briggs, G. A. D. (1977). The effect of tangential force on the contact of elastic solids in adhesion. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 356, 103.
- Severson, B. L., Keer, L. M., Ottino, J. M., & Snurr, R. Q. (2009). Mechanical damping using adhesive micro or nano powders. *Powder Technology*, 191(1-2), 143-148.
- Shi, X. H., & Zhao, Y. P. (2004). Comparison of various adhesion contact theories and the influence of dimensionless load parameter. *Journal of Adhesion Science and Technology*, 18(1), 55-68.
- Shuai, W., Xiang, L., Huilin, L., Guodong, L., Jiaxing, W., & Pengfei, X. (2011). Simulation of cohesive particle motion in a sound-assisted fluidized bed. *Powder Technology*, 207(1-3), 65-77.
- Soulié, F., Cherblanc, F., El Youssoufi, M. S., & Saix, C. (2006). Influence of liquid bridges on the mechanical behaviour of polydisperse granular materials. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 30(3), 213-228.
- Tabor, D. (1977). Surface forces and surface interactions. *Journal of Colloid and Interface Science*, 58(1), 2-13.
- Tatemoto, Y., Mawatari, Y., & Noda, K. (2005). Numerical simulation of cohesive particle motion in vibrated fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, 60(18), 5010-5021.
- Thornton, C., & Yin, K. K. (1991). Impact of elastic spheres with and without adhesion. *Powder Technology*, 65(1-3), 153-166.
- TWI. (2013). TWI. Retrieved July 6th, 2013, from <http://www.twi.co.uk/technical-knowledge/faqs/material-faqs/faq-what-are-the-typical-values-of-surface-energy-for-materials-and-adhesives/>
- Tykhoniuk, R., Tomas, J., Luding, S., Kappl, M., Heim, L., & Butt, H.-J. (2007). Ultrafine cohesive powders: From interparticle contacts to continuum behaviour. *Chemical Engineering Science*, 62(11), 2843-2864.
- Verwey, E. J. W., & Overbeek, J. T. G. (1948). *Theory of stability of lyophobic colloids*. Amsterdam: Elsevier

- Walton, O. R., & Braun, R. L. (1986). Viscosity, granular-temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks. *Journal of Rheology*, 30(5), 949-980.
- Wang, X. S., & Rhodes, M. J. (2005). Using pulsed flow to overcome defluidization. *Chemical Engineering Science*, 60(18), 5177-5181.
- Wu, K. C., & You, H. I. (2007). Determination of solid material elastic modulus and surface energy based on JKR contact model. *Applied Surface Science*, 253(20), 8530-8537.
- Xu, D. W., Liechti, K. M., & Ravi-Chandar, K. (2007). On the modified Tabor parameter for the JKR-DMT transition in the presence of a liquid meniscus. *Journal of Colloid and Interface Science*, 315(2), 772-785.
- Yang, R., Zou, R., Dong, K., An, X., & Yu, A. (2007). Simulation of the packing of cohesive particles. *Computer Physics Communications*, 177(1-2), 206-209.
- Yang, R. Y., Zou, R. P., & Yu, A. B. (2003a). Effect of material properties on the packing of fine particles. *Journal of Applied Physics*, 94(5), 3025.
- Yang, R. Y., Zou, R. P., & Yu, A. B. (2003b). Numerical study of the packing of wet coarse uniform spheres. *AIChE Journal*, 49(7), 1656-1666.
- Yang, S. C. (2006). Segregation of cohesive powders in a vibrated granular bed. *Chemical Engineering Science*, 61(18), 6180-6188.
- Yang, S. C., & Hsiau, S. S. (2001). The simulation of powders with liquid bridges in a 2D vibrated bed. *Chemical Engineering Science*, 56(24), 6837-6849.
- Ye, M., van der Hoef, M. A., & Kuipers, J. A. M. (2004). A numerical study of fluidization behavior of Geldart A particles using a discrete particle model. *Powder Technology*, 139(2), 129-139.
- Zhang, R., & Li, J. (2006). Simulation on mechanical behavior of cohesive soil by Distinct Element Method. *Journal of Terramechanics*, 43(3), 303-316.
- Zhou, Y. C., Xu, B. H., Yu, A. B., & Zulli, P. (2002). An experimental and numerical study of the angle of repose of coarse spheres. *Powder Technology*, 125(1), 45-54.
- Zhu, H. P., Zhou, Z. Y., Yang, R. Y., & Yu, A. B. (2007). Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments. *Chemical Engineering Science*, 62(13), 3378-3396.
- Zuo, S.-c., Xu, Y., Yang, Q.-w., & Feng, Y. T. (2006). Discrete element simulation of the behavior of bulk granular material during truck braking. *Engineering Computations*, 23(1), 4-15.